



**João Alexandre
Dias de Oliveira**

**Modelação Micromecânica do Comportamento de
Materiais Compósitos de Matriz de Alumínio**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação científica do Doutor Filipe M.H.V. Teixeira-Dias, Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

Apoio financeiro do POCTI no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio.

Apoio financeiro da FCT e do FSE no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio.

o júri

presidente

Prof. Doutor Alfredo Manuel Balacó de Moraes
Professor Associado da Universidade de Aveiro

Prof.^a Doutora Marta Cristina Cardoso de Oliveira
Professora Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Prof. Doutor Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

Mestre Joaquim Alexandre Mendes de Pinho da Cruz
Assistente Convidado da Universidade de Aveiro

agradecimentos

À Carolina.
Ao Rui e ao João.
Por tudo, simplesmente por serem vós.

Ao Professor Doutor Filipe Teixeira-Dias, como orientador e acima de tudo como amigo. A sua postura profissional e pessoal sempre constituíram motivações para seguir o meu sentido de responsabilidade e promover o desenvolvimento da minha formação. Um imenso obrigado pela confiança, pelo apoio e, acima de tudo, pela amizade que temos construído ao longo destes anos de trabalho.

Ao Engenheiro Alexandre Pinho da Cruz, uma das melhores pessoas que conheço assim como, sem margem para dúvidas, uma das mentes mais brilhantes. Devo-lhe boa parte do meu trabalho, assim como do prazer que tiro daquilo que faço. Incontestável e sempre presente amigo, foi e espero que continue a ser grande companheiro em discussões científicas, muitas vezes quase filosóficas, que deram cor às longas horas passadas em noites de trabalho. A uma das pessoas que tenho como mais próximas, um fraterno obrigado.

Ao Doutor Gil Andrade-Campos, colega e grande amigo, pela sua fé e constante apoio. Muitas vezes responsável por me fazer descer um pouco do alto do meu utópico romantismo profissional, mostrou-me também um novo mundo de serviço e de fortes amizades.

Ao Engenheiro Hugo Calisto, irmão de armas e de vida. *By heart, if not by blood.*

Ao Enrique, à Paula e a um restrito grupo de pessoas que realmente me enriquecem com a sua presença na minha vida.

A todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para este trabalho, ou simplesmente o facilitaram. Em particular, a todos os colegas e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro e do Departamento de Engenharia Mecânica e Gestão Industrial da Escola Superior de Tecnologia de Viseu.

Ao grupo de Física Teórica da Matéria Condensada do Departamento de Física da Universidade de Aveiro. Em particular, ao Professor Doutor Vítor Torres e ao Dr. Manuel Barroso (gestor do Tetis), pelo facto de terem prontamente disponibilizado a utilização do *cluster* Tetis e pelo precioso apoio disponibilizado durante os ensaios de cálculo paralelo.

À Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), por todo o apoio prestado no âmbito do projecto POCTI/EME/39403/2001.

Aos meus pais, João Mário e Maria de Fátima, porque, muitas vezes, os últimos são também os primeiros. Com trabalho e confiança, sempre me permitiram perseguir o meu futuro. A eles devo boa parte daquilo que sou como pessoa.

A todos e a cada um deixo o mais sincero e grato abraço.

Muito Obrigado!

palavras-chave

Materiais Compósitos de Matriz Metálica; Elementos Finitos; Elasticidade Linear; Homogeneização por Expansão Assimptótica; Células Representativas Unitárias; Periodicidade.

resumo

Na simulação numérica do comportamento de materiais Compósitos de Matriz Metálica (CMM) reforçados com partículas de material cerâmico é frequentemente necessário recorrer a malhas de elementos finitos não-estruturadas. A grande quantidade de memória necessária e de tempo de cálculo despendido obrigam a uma optimização do cálculo estrutural. Assim, é de fulcral importância desenvolver procedimentos e modelos numéricos que permitam prever e estudar algumas das particularidades de comportamento destes materiais. Uma das metodologias que permite este tipo de estudo é a Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA). Esta abordagem pode ser utilizada para determinar propriedades mecânicas efectivas e globais a partir do comportamento de um volume representativo na microescala – a Célula Representativa Unitária (CRU). Todavia, a modelação com CRU requer o controlo criterioso de alguns parâmetros. De entre estes destacam-se a fracção volúmica de reforço e a topologia/distribuição das partículas de reforço no seio da matriz do CMM. Adicionalmente, a complexidade geométrica inerente a este tipo de células representativas unitárias implica a utilização de malhas de elementos finitos não-estruturadas, que exigem um controlo específico das condições de fronteira de periodicidade. Face ao exposto, desenvolve-se um programa de simulação numérica para análise tridimensional com os métodos dos elementos finitos e de homogeneização por expansão assimptótica. Implementam-se metodologias de paralelização do programa para processamento em *clusters* Beowulf com a interface de passagem de mensagens MPI. Desenvolvem-se também ferramentas de geração automática de células representativas unitárias, definindo alguns parâmetros do material e de geração de ficheiros de geometria. Descrevem-se os algoritmos de associação de graus de liberdade para estabelecer condições de fronteira de periodicidade em malhas de elementos finitos estruturadas e não-estruturadas. Realizam-se testes numéricos de validação dos modelos e algoritmos implementados. Estuda-se a influência das distribuições de partículas e da fracção volúmica de reforço no comportamento de materiais compósitos de matriz de alumínio.

keywords

Metal Matrix Composites; Finite Elements; Linear Elasticity; Asymptotic Expansion Homogenisation; Representative Unit-Cells; Periodicity.

abstract

When numerically simulating the behaviour of Metal Matrix Composites (MMC) reinforced with ceramic particles it is often necessary to use non-structured finite element meshes. The need for significant resources in terms of memory and CPU time leads to the use of dedicated optimisation methodologies. Numerical models that predict the behaviour of these materials are developed with these methodologies. One of these methods is the Asymptotic Expansion Homogenisation (AEH). Applying the AEH, overall material properties can be derived from the mechanical behaviour of selected microscale representative volumes (a.k.a. representative unit-cells, RUC). Nevertheless, unit-cell based modelling requires the control of some parameters, such as reinforcement volume fractions, shapes and distributions within the matrix material. This leads to the development of automatic geometry generation algorithms. Additionally, non-structured tetrahedral meshes required by these types of RUC involve the control of specific periodic boundary conditions. In the scope of this work, a numerical simulation model is developed for three-dimensional finite element analyses (FEA) with asymptotic expansion homogenisation. Parallel computing methodologies are implemented on a Beowulf cluster with the Message Passing Interface (MPI). Automatic representative unit-cell generation procedures are also developed, with control over relevant geometrical parameters. Additionally, specific algorithms are developed for the association of degrees of freedom, in order to enforce periodicity boundary conditions over structured and non-structured finite element meshes. Numerical simulations are performed in order to validate the implemented procedures and to evaluate the influence of particle distributions and reinforcement volume fractions on the overall MMC behaviour.

mots-clés

Matériaux Composites à Matrice Métallique; Éléments Finis; Élasticité Linéaire; Homogénéisation par Expansion Asymptotique; Cellules Représentatives Unitaires; Périodicité.

résumé

La simulation numérique du comportement de matériaux Composites à Matrice Métallique (CMM) renforcés avec des particules céramiques rend fréquemment nécessaire l'utilisation de réseaux d'éléments finis non-structurés. Les considérables temps de calcul et quantités de mémoire résultants appellent ainsi à l'utilisation de méthodologies d'optimisation. Il est ainsi essentiel de développer des procédés et des modèles numériques permettant prévoir et étudier quelques unes des particularités du comportement de ce type de matériau. Une des méthodologies permettant ce genre d'étude est l'Homogénéisation par Expansion Asymptotique (HEA). Cet abordage peut être utilisé afin de déterminer des propriétés mécaniques effectives et globales à partir du comportement d'un volume représentatif en micro-échelle – la Cellule Représentative Unitaire (CRU). La modélisation de la CRU exige néanmoins un contrôle judicieux de certains paramètres, parmi lesquels la fraction volumétrique de renforts et leur topologie/distribution au sein de la matrice métallique. La complexité géométrique inhérente à ce type de CRU implique l'utilisation de réseaux d'éléments finis non-structurés, exigeant un contrôle spécifique des conditions de frontière de périodicité. Un programme de simulation numérique destiné à une analyse tridimensionnelle, utilisant les méthodes de réseaux d'éléments finis et d'homogénéisation par expansion asymptotique, a ainsi été développé. Des méthodologies de parallélisation du programme afin de permettre son utilisation sur *clusters* Beowulf, avec interface de passage MPI, ont été implémentées. Ont aussi été développées des outils de génération automatique de cellule représentative unitaire, passibles de définir quelques paramètres du matériau et de créer les fichiers de géométrie nécessaires. Les algorithmes d'association de degrés de liberté, nécessaires à l'établissement de conditions de frontière de périodicité pour des réseaux d'éléments finis structurés et non-structurés, sont également décrits. Des tests numériques de validation des modèles et algorithmes utilisés sont effectués, et l'influence des distributions de particules et des fractions volumétriques de renforts sur le comportement des matériaux composites à matrice d'aluminium est étudiée.

Conteúdo

I	Modelação Matemática e Numérica	1
1	Introdução	3
1.1	Enquadramento	3
1.2	Materiais Compósitos de Matriz Metálica (CMM)	4
1.3	Metodologias de Homogeneização	5
1.4	Objectivos	10
1.5	Guia de Leitura	10
2	Modelo Mecânico	13
2.1	Introdução	13
2.2	Elasticidade Isotrópica	13
2.2.1	Equilíbrio Estático	13
2.2.2	Lei de Hooke Generalizada	15
2.3	Elasticidade Anisotrópica	17
2.4	Propriedades Elásticas de Materiais Compósitos	18
2.4.1	Lei das Misturas	18
2.4.2	Associação de Materiais em Paralelo	20
2.4.3	Associação de Materiais em Série	21
3	Homogeneização por Expansão Assimptótica em Elasticidade Linear	23
3.1	Formulação Diferencial do Problema de Elasticidade	24
3.2	Expansão Assimptótica do Campo de Deslocamentos	26
3.3	Equações Diferenciais da Microescala	28
3.4	Equações Diferenciais da Macroescala	30
3.5	Correctores de Deslocamento de Ordem Superior	31
3.6	Metodologia Convencional de Homogeneização	33
3.7	Metodologia Convencional de Localização	34
3.8	Considerações Finais	35
4	Método dos Elementos Finitos	37
4.1	Introdução	37
4.2	Discretização Espacial do Problema	37
4.3	Elementos Finitos Isoparamétricos	39
4.4	Formulação de Elementos Finitos	44
4.5	Integração Numérica	45
4.6	Integração Reduzida Selectiva	45

4.7	Problema Global	47
4.7.1	Sistema de Equações	47
4.7.2	Condições de Fronteira	48
4.7.2.1	Método de Penalidade	48
4.7.2.2	Método dos Multiplicadores de Lagrange	49
5	Implementação	53
5.1	Introdução	53
5.2	O Programa 3DFRAN	53
5.2.1	Pré-Processamento	53
5.2.2	Integração Elementar	54
5.2.3	Formato de Armazenamento	54
5.2.4	Resolução do Sistema de Equações	55
5.2.4.1	Método do Gradiente Conjugado	57
5.2.4.2	Técnicas de Precondicionamento	59
5.2.5	Cálculo Multiescala — Homogeneização por Expansão Assimptótica	60
5.2.5.1	Cálculo do Corrector χ	60
5.2.5.2	Condições de Fronteira Periódicas	61
5.2.5.3	Cálculo Numérico da Matriz \mathbf{D} Homogeneizada	62
5.2.5.4	Localização	62
5.3	Geração de Células Representativas Unitárias — O Programa SPHERECELL	62
5.4	A Sub-Rotina SLAVERY	64
5.5	Processamento Paralelo	71
5.5.1	Noções Gerais de Desempenho	71
5.5.2	<i>Cluster</i> Beowulf	73
5.5.3	Interface de Passagem de Mensagens (MPI)	74
5.5.4	Sistema de Equações	75
II	Resultados	77
6	Resultados e Aplicações	79
6.1	Introdução	79
6.2	Validação Numérica — Macroescala	79
6.3	Estudos de Desempenho	88
6.3.1	Seleccção de Precondicionadores	88
6.3.2	Cálculo Paralelo	90
6.4	Validação Numérica — Microescala	92
6.4.1	Estudos Preliminares	92
6.4.2	Malhas Não-Estruturadas	97
6.5	Efeito da Fracção Volúmica de Reforço	103
6.6	Análise Macroestrutural	113
7	Considerações Finais	121
7.1	Conclusões	121
7.2	Perspectivas de Trabalho Futuro	123

A	Notação, Nomenclatura e Siglas	125
A.1	Notações Algébricas	125
A.2	Subíndices e Superíndices	125
A.3	Mecânica dos Meios Contínuos	126
A.4	Homogeneização	126
A.5	Método dos Elementos Finitos	127
A.6	Métodos Numéricos	127
A.7	Siglas	128
	Bibliografia	129

Parte I

Modelação Matemática e Numérica

Capítulo 1

Introdução

No presente capítulo abordam-se, essencialmente, os objectivos gerais e as motivações deste trabalho. Caracteriza-se sucintamente o tipo de materiais que constitui o objecto de estudo do trabalho e faz-se uma breve revisão dos métodos de homogeneização mais comuns e de algumas aplicações específicas do método da Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA).

1.1 Enquadramento

Grande parte dos materiais de engenharia modernos são constituídos por diferentes fases, diferenciáveis numa dada escala dimensional. Um exemplo deste tipo de materiais são os materiais compósitos. Estes são compostos por dois ou mais constituintes que diferem em forma e em composição química. Outros materiais heterogêneos são, por exemplo, o osso, a madeira, os materiais com gradiente funcional de propriedades (*Functionally Gradient Materials* — FGM), *etc.*

Apesar dos materiais não-homogêneos terem já uma evidente importância em termos de engenharia, em certas situações o seu comportamento térmico e/ou mecânico ainda não é totalmente compreendido pela comunidade científica. Consequentemente, a simulação numérica assume um papel de fulcral importância na quase generalidade das actividades de investigação e desenvolvimento actuais nesta área, nomeadamente quando se pretende compreender de modo mais profundo as complexidades do comportamento mecânico e dos processos tecnológicos e produtivos. Recorrendo à simulação numérica é possível reduzir os custos de desenvolvimento e minimizar os custos de produção dos materiais.

Na última década tem sido realizado muito trabalho de investigação na modelação numérica do comportamento destes materiais utilizando, por exemplo, o Método dos Elementos Finitos (MEF). No entanto, devido à complexidade topológica destes materiais, a maioria destes estudos é bidimensional. Assim, é muito importante que se desenvolvam procedimentos e modelos numéricos tridimensionais que permitam prever e estudar algumas das particularidades de comportamento dos materiais multifásicos. Estes estudos podem basear-se na determinação das propriedades e do comportamento efectivo do material, quer a partir das propriedades dos materiais constituintes quer recorrendo a técnicas numéricas de homogeneização. Estas últimas técnicas podem ser utilizadas para deduzir propriedades efectivas a partir do comportamento mecânico de um volume representativo

da microescala — a Célula Representativa Unitária (CRU). É neste contexto que surge o trabalho que aqui se apresenta.

1.2 Materiais Compósitos de Matriz Metálica (CMM)

Um material compósito é formado pela mistura ou combinação de dois ou mais micro- ou macroconstituintes insolúveis que diferem na forma e na composição química [Smith 98]. Porém, sendo esta definição insuficiente, este tipo de material deve ser avaliado sob três critérios adicionais [Mathews 94]. Em primeiro lugar, ambos os constituintes terão de estar presentes na mistura em proporções razoáveis, *i.e.* com um teor mínimo de 5%. Em segundo lugar, apenas faz sentido falar de materiais compósitos se os seus constituintes tiverem propriedades distintas. Por fim, um material compósito de engenharia deverá ser produzido de forma controlada, de modo a obter propriedades próximas das desejadas.

O constituinte que, na maioria dos casos, se encontra presente em maior quantidade é designado por matriz. Em geral, esta pode ser metálica, cerâmica ou polimérica. O segundo constituinte é designado por reforço. Na generalidade dos casos, o reforço tem maior dureza e rigidez [Mathews 94] e pode ser de um dos seguintes tipos: (i) fibras contínuas, (ii) fibras descontínuas e *whiskers*, ou (iii) partículas [Smith 98]. As partículas têm dimensões aproximadamente iguais em todas as direcções. A sua geometria pode ser aproximadamente esférica, cúbica ou irregular. A distribuição pode ser aleatória ou seguir uma organização específica. No entanto, na maioria dos materiais compósitos reforçados com partículas a distribuição é aleatória. Quanto aos reforços em forma de fibras, estes caracterizam-se por terem comprimentos muito superiores às dimensões transversais. Os reforços de fibras descontínuas podem organizar-se de forma aleatória ou segundo direcções preferenciais e a razão entre o comprimento, L , e o diâmetro, D , das fibras é geralmente $L/D < 50$. No caso de fibras contínuas, as orientações são geralmente uni- ou bidireccionais, sendo $L/D > 1000$. Refira-se ainda que a quantidade de reforço que pode ser envolvido pela matriz é limitada por factores como, por exemplo, a geometria do reforço ou a natureza da interface entre os dois materiais. Com reforços de partículas em matrizes metálicas, os limites de fracção volúmica de reforço são frequentemente mantidos abaixo dos 40%. Porém, para algumas aplicações é possível atingir fracções volúmicas de reforço superiores a 70%. Por outro lado, no caso de fibras contínuas, o limite máximo situa-se em torno dos 70%, devido a limitações geométricas e à necessidade de evitar contacto entre as fibras, normalmente responsável pelo aparecimento de dano [Mathews 94].

Neste trabalho, abordam-se preferencialmente os materiais Compósitos de Matriz Metálica (CMM), mais concretamente os de matriz de alumínio. Os CMM são materiais cuja utilização está em franco crescimento, especialmente devido às suas excelentes propriedades mecânicas específicas, com aplicações cada vez mais comuns nas indústrias aeroespacial e automóvel. A matriz é usualmente um metal leve, como o alumínio, o magnésio ou o titânio. O material de reforço tem utilidades variadas, sendo utilizado não só com fins estruturais mas também para influenciar outras propriedades como, por exemplo, a resistência ao desgaste ou a condutibilidade térmica. Neste tipo de materiais compósitos é mais comum a utilização de reforços descontínuos, *i.e.* de fibras descontínuas ou partículas, por permitirem a produção por técnicas comuns de processamento de materiais metálicos.

1.3 Metodologias de Homogeneização

Os materiais heterogêneos como, por exemplo, os materiais compósitos, possuem, por definição, duas ou mais fases distintas, cujas interações originam um comportamento global diferente do de cada material constituinte. As estimativas calculadas para as propriedades destes materiais determinam a qualidade das aproximações obtidas em simulação numérica. Por outro lado, a modelação detalhada de estruturas com materiais compósitos acarreta frequentemente custos computacionais demasiado elevados. Atendendo a estes factores, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos. Nestas metodologias, úteis para a análise de microestruturas tridimensionais complexas, assume-se ser possível definir uma Célula Representativa Unitária (CRU) recorrendo à imposição de condições de fronteira específicas [Chung 99b]. As operações realizadas sobre a CRU e a compreensão da sua resposta por comparação com a lei de Hooke generalizada ou princípios energéticos permitem determinar aproximações às propriedades homogeneizadas do material. De facto, os detalhes geométricos e físicos da CRU são processados de modo a darem lugar a um conjunto único de propriedades médias, representativas das heterogeneidades do material. Estas propriedades podem ser o resultado de problemas de estudo do comportamento homogeneizado ou valores intermédios para serem utilizados subsequentemente em análises da estrutura global [Böhm 98]. O pressuposto da existência de uma microestrutura definida e única, fundamental em todas as metodologias de homogeneização, numéricas ou analíticas, implica a existência de uma estrutura global homogênea — a macroescala — e de uma estrutura local — a microescala —, representativa da microestrutura do material e diferente da estrutura global, quer em dimensão quer em escala [Chung 99b]. Alguns métodos permitem também verificar o comportamento do material na microescala com base em resultados da macroescala. Este processo, inverso da homogeneização, designa-se por localização.

Em termos históricos, as tendências iniciais para o cálculo das propriedades efectivas de materiais compósitos são de previsão matemática de limites para as suas propriedades [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892, Hashin 62, Hashin 63, Hill 63, Hashin 64]. Metodologias analíticas, como as leis de misturas, ou fórmulas semiempíricas, como as equações de Halpin-Tsai, podem ser utilizadas, mas revelam-se limitativas em termos da qualidade da previsão de propriedades devido ao seu fundamento físico pouco abrangente [Böhm 98]. No entanto, geometrias simples com distribuições definidas de inclusões esféricas ou cilíndricas, por exemplo, permitem a utilização destes métodos analíticos [Chung 99b].

A associação de metodologias mais complexas a simulações com o método dos elementos finitos visa contornar parte das limitações dos métodos clássicos. Em geral, as estratégias de homogeneização procuram determinar a resposta de um dado elemento de volume a um conjunto de condições de fronteira, a partir da qual se deduzem as propriedades globais. A forma mais directa de o fazer consiste na caracterização do comportamento do material, simulando a sua resposta a carregamentos simples. Todos os métodos aqui apresentados permitem este tipo de caracterização, com a possível excepção dos métodos de estabelecimento de limites (*bounding methods*). Muitas metodologias de homogeneização podem também ser aplicadas directamente como modelos micromecânicos de comportamento para escalas de maior dimensão, *i.e.* podem relacionar o tensor de tensões homogeneizado com o tensor de deformações homogeneizado ou fornecer a rigidez homogeneizada instantânea,

no caso de materiais com comportamento não-linear. Note-se que o comportamento mecânico global é tipicamente mais complexo que o comportamento dos seus constituintes, pelo que, em muitos casos, os efeitos da interacção entre os materiais constituintes não podem ser satisfatoriamente descritos pela simples ponderação volúmica das suas propriedades [Böhm 98].

As metodologias de homogeneização mais comuns podem ser subdivididas em dois grupos principais. O primeiro grupo é constituído por métodos que consideram os pormenores da microgeometria de materiais heterogéneos com base em informações estatísticas. São incluídos neste grupo os métodos de campo médio (*Mean Field Approaches* — MFA) e os métodos de limites por princípios variacionais (*Variational Bounding Methods* — VBM) [Böhm 98].

Nos métodos de campo médio e metodologias afins, os campos de tensão em cada constituinte são aproximados com base nas suas médias, isto é, aplicam-se campos uniformes de tensão e deformação em cada fase, assumindo que os campos de tensão e deformação na matriz e nas inclusões podem ser representados adequadamente pelas suas médias volúmicas, levando em linha de conta a interacção elástica entre inclusões [Segurado 02]. Estes métodos usam informação acerca da topologia microscópica, geometria e orientação das inclusões, assim como, eventualmente, informação estatística acerca da distribuição dos constituintes. Estes métodos tendem a ser formulados em termos de tensores de concentração das fases, sendo métodos bastante utilizados e com custos computacionais relativamente reduzidos. Os mais comuns são os métodos de Mori-Tanaka (de campo efectivo) e vários métodos derivados [Duschlbauer 03], o esquema autoconsistente de Hill [Hill 65] e o método diferencial [Segurado 02]. Estes métodos, assim como grande parte dos métodos de campo médio, baseiam-se nos trabalhos pioneiros de Eshelby sobre o campo de tensões em inclusões elípticas isoladas numa matriz elástica [Eshelby 57, Böhm 02, Segurado 02]. Torquato obtém relações mais exactas para o módulo volumétrico e de corte de um material compósito isotrópico truncando os termos de ordem superior (acima do terceiro) numa expansão em série do tensor de rigidez efectiva [Torquato 91, Torquato 98a, Torquato 98b]. Os primeiros termos da expansão são funções de parâmetros estatísticos de correlação que contêm informação sobre a distribuição das diferentes fases. A generalidade dos modelos de campo médio podem ser considerados como casos especiais de métodos variacionais de Hashin-Shtrikman, com selecções apropriadas do material de referência [Böhm 98].

Por sua vez, os métodos de estabelecimento de limites por princípios variacionais são usados para obter limites superiores e inferiores para os tensores elásticos, módulos elásticos e outras propriedades físicas de materiais heterogéneos [Böhm 98]. Muitos métodos analíticos de determinação de limites podem obter-se a partir de campos uniformes de tensão em cada fase constituinte (polarização). Os limites constituem ferramentas importantes para validar outros modelos. Para além disso, em muitos casos, um dos limites fornece uma boa estimativa para a propriedade efectiva em estudo [Torquato 91]. Note-se que os limites são estabelecidos apenas para a resposta global, sendo que estes métodos nunca são aplicados a estratégias de localização. A base destes métodos advém dos limites superiores (de Voigt) e inferiores (de Reuss), conhecidos como limites de Voigt-Reuss [Segurado 02] ou, na forma tensorial, como limites de Hill. Limites que definem intervalos de admissibilidade mais apertados podem ser determinados a partir das formulações de Hashin-Shtrikman [Hashin 63], que constituem os melhores limites de dois pontos determinados apenas com informação acerca da fracção volúmica [Segurado 02]. Estes podem ainda ser melhorados com limites

de três pontos, que acrescentam informação acerca da distribuição das fases aos parâmetros estatísticos referidos anteriormente [Torquato 91, Segurado 02].

O segundo grupo de aproximações baseia-se no estudo de microestruturas discretas e inclui as metodologias de campo periódico (*Periodic Microfield Approaches* — PMA), de células embebidas (*Embedded Cell Approaches* — ECA) e de janelas (*Windowing Approaches*) [Böhm 98].

Nas metodologias de campo periódico (ou métodos de célula unitária) o material heterogêneo é aproximado por um modelo infinito com um arranjo periódico de fases constituintes. Os campos locais são avaliados com a análise de células representativas unitárias, que podem representar microgeometrias que variam desde arranjos simples a distribuições complexas de constituintes, através de métodos analíticos ou numéricos. Estes campos são utilizados para a caracterização de materiais em domínios não-lineares ou como modelos constitutivos para o comportamento de uma estrutura global. As metodologias PMA podem fornecer informação detalhada sobre os campos locais de tensão e deformação na célula unitária, mas tendem a ser computacionalmente dispendiosos.

Outra família de metodologias é a das células embebidas. Neste caso, o material heterogêneo é aproximado por um modelo que consiste num núcleo contendo a distribuição discreta das fases, envolvido por uma região exterior, na qual se aplicam campos de deslocamentos ou de forças. As propriedades do material desta região podem ser descritas por uma lei constitutiva macroscópica, podem ser determinadas pelo comportamento do núcleo heterogêneo ou ainda assumir a forma de uma discretização grosseira do arranjo de fases. Estes métodos podem ser utilizados para caracterizar o material e constituem, muitas vezes, a melhor opção para estudar regiões específicas em materiais heterogêneos como, por exemplo, extremidades de fendas e as suas fronteiras. Assim como as PMA, as metodologias ECA podem ser utilizadas para localização no núcleo heterogêneo com elevado detalhe, mas tendem a ser computacionalmente onerosas [Böhm 98].

Os métodos de janelas consistem na selecção de regiões de diferentes dimensões, normalmente rectangulares ou hexaédricas, de um dado arranjo de fases. Quando estas regiões são sujeitas a condições de fronteira de tensão ou deformação macro-homogêneas, obtêm-se estimativas para os limites superior e inferior do comportamento global do material.

No presente trabalho, a metodologia de homogeneização utilizada é do tipo célula unitária. A estratégia mais versátil para separar a macro- da microescala numa análise com célula unitária baseia-se na teoria matemática conhecida como Homogeneização Assimptótica ou Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA). Em vez de se resolver unicamente o problema da célula representativa unitária (microescala), introduzem-se explicitamente coordenadas macroscópicas e microscópicas na formulação do problema. A HEA permite a utilização do método dos elementos finitos na micro- e na macroescala, numa análise chamada habitualmente de multiescala [Böhm 98]. A homogeneização por expansão assimptótica, para além de permitir o processamento de uma grande variedade de células representativas unitárias, permite ainda verificar, de forma detalhada, o comportamento do material na microescala com base em resultados da macroescala (localização). Esta metodologia de homogeneização assenta em dois princípios fundamentais [Chung 99b]: (i) os deslocamentos (ou outra variável primária como, por exemplo, a temperatura ou velocidade de escoamento) podem ser caracterizados por uma série assimptótica e (ii) as características úteis da microestrutura são definidas na célula unitária, representativa da periodicidade na microescala. Os termos da série fornecem as variáveis necessárias para

o cálculo das propriedades micromecânicas locais, gradientes locais e resposta estrutural global. A homogeneização por expansão assintótica pode ainda ser aplicada a problemas com três ou mais escalas distintas [Bensoussan 78], como um processo iterativo de homogeneização. Aplicando sucessivamente o procedimento de duas escalas, o método pode ser expandido para cálculo multiescala generalizado.

A generalidade das aplicações da homogeneização por expansão assintótica surge em problemas de mecânica estrutural. Isto deve-se quer ao grande número de problemas passíveis de serem modelados em elasticidade linear quer à robustez das formulações de mecânica dos meios contínuos em problemas não-lineares. As limitações verificadas em aplicações como, por exemplo, de transferência de calor, mesmo para pequenos desvios da linearidade, parecem não estar presentes em mecânica estrutural [Chung 99b]. As formulações iniciais aplicam-se a problemas simples de elasticidade [Bensoussan 78, Sanchez-Palencia 80], mas observam-se desenvolvimentos mais aprofundados à medida que aumenta a complexidade dos problemas. Destacam-se de seguida alguns exemplos destes desenvolvimentos.

Uma metodologia de optimização topológica é introduzida por Bendsoe e Kikuchi [Bendsoe 88]. Esta aproximação não limita o problema a topologias idênticas no início e no fim do problema, e evita novas gerações de malha. A homogeneização por expansão assintótica é utilizada para calcular repetidamente propriedades homogeneizadas até que a distribuição de material satisfaça os requisitos impostos. O processo resulta numa distribuição ideal do material na microescala, a partir de uma dada quantidade de pequenos vazios num material isotrópico homogêneo. A utilização de malha adaptativa para melhorar a definição geométrica e numérica no cálculo das propriedades de materiais compósitos de comportamento linear elástico é considerada por Guedes e Kikuchi [Guedes 90]. Estudos de convergência e estimativas de erro são também realizados no contexto do método dos elementos finitos. Apresentam-se detalhes da formulação de elementos finitos para materiais lineares elásticos, assim como interpretações físicas dos resultados da HEA. Hollister e Kikuchi [Hollister 92] comparam ainda as propriedades homogeneizadas por HEA com as aproximações da mecânica dos materiais. As densidades de energia de deformação são calculadas e comparadas entre um caso com homogeneização e outro com modelação detalhada ao nível da macroescala. As metodologias da mecânica dos materiais baseiam-se em técnicas de medição de rigidez e representam a estimativa analítica de limites para as propriedades elásticas dos materiais considerados [Chung 99a]. Este estudo mostra a coerência entre as duas metodologias em elasticidade linear.

Surgem aplicações da HEA em diversas áreas. Na biomecânica, o procedimento de homogeneização é utilizado para estudar as propriedades elásticas das estruturas porosas do osso trabecular [Hollister 91]. Determinam-se informações globais e locais, e estima-se a rigidez do material, a qual é comparada posteriormente com resultados experimentais. Mostra-se também a elevada importância de uma correcta modelação da microescala. Baseados em publicações anteriores, relativas à análise de dano em materiais compósitos de fibras unidireccionais, Lene e Paumelle [Lene 92] estudam o dano em materiais compósitos fabricados a partir de mantas de fibras. Tratam da aplicação de equações constitutivas de elasticidade linear, simulando o dano como escorregamento numa interface. Esta contribuição é orientada para uma aplicação específica a um tipo diferente de material compósito. Kawamoto e Kyoya [Kawamoto 93] apresentam estudos sobre rocha porosa e ligações aparafusadas nestes materiais, usando alguns desenvolvimentos iniciais da HEA para materiais elásticos [Guedes 90]. Estes estudos apresentam propriedades elásticas efectivas para dife-

rentes fracções volúmicas num estudo de geomecânica. Lefik e Schrefler [Lefik 94] aplicam HEA à teoria de vigas em elasticidade linear, incluindo rotações. O trabalho apresentado indica que o procedimento de homogeneização não se restringe necessariamente a dois ou três graus de liberdade por nó. O objectivo global deste trabalho é estender os princípios gerais da HEA de meios contínuos às vigas.

Whitcomb [Whitcomb 91] propõe uma metodologia para estudar o dano localizado nas interfaces fibra-fibra e fibra-matriz de materiais compósitos de fibras unidireccionais com secções transversais arbitrárias. O dano é simulado recorrendo a elementos finitos de espessura nula na região danificada. A magnitude da descontinuidade é determinada com base no critério de atrito de Coulomb. O material é considerado elástico e o autor usa definições termodinâmicas para avaliar a evolução do dano. A sua contribuição em termos de homogeneização é essencialmente ao nível da modelação da microescala. Em meados dos anos 1990, a popularidade dos materiais compósitos fabricados com mantas de fibras leva a um aumento da investigação em torno da HEA. Shkoller e Hegemier [Shkoller 95] apresentam estudos matemáticos do problema linear elástico com vista a generalizar a convergência do método. As formulações matemáticas iniciais correspondem a convergência em duas escalas, ao passo que Shkoller e Hegemier são os primeiros a estudar processos de homogeneização e convergência num único passo. Este desenvolvimento elimina a necessidade de aproximar os deslocamentos com séries assintóticas e resolver sistemas de equações diferenciais parciais hierárquicas [Chung 99b]. Dasgupta *et al.* [Dasgupta 96] desenvolvem as equações multiescala para termoelasticidade utilizando a homogeneização por expansão assintótica. No entanto, em vez da função característica (corrector) utilizada na maioria das aplicações da HEA, recorrem a teorias de resistência dos materiais semelhantes às aplicadas por Whitcomb [Whitcomb 91]. A diferença reside na aplicação das condições de fronteira de periodicidade. Estas são aplicadas de modo a impor estados de tensão e deformação na microestrutura, diferentes das condições de periodicidade aplicadas usualmente em HEA. Não discutem vantagens associadas a esta metodologia, mas apresentam boas aproximações a resultados experimentais.

Actualmente, surgem ainda aplicações da homogeneização por expansão assintótica na determinação das propriedades elásticas de nanotubos. Em geral, utilizam-se metodologias de HEA e correlações entre mecânica molecular e mecânica estrutural para estabelecer previsões das propriedades efectivas de diferentes configurações e arranjos de nanotubos. Em particular, as propriedades elásticas de materiais compósitos reforçados com nanotubos são também estudadas [Song 06], obtendo-se boas aproximações entre os resultados numéricos e os resultados analíticos.

Por sua vez, as complexidades microestruturais das células representativas unitárias, usualmente obtidas por modelação sólida, podem ser modeladas com base em diferentes técnicas. Assim, utilizando a modelação geométrica baseada em técnicas de imagem digital, Golanski *et al.* [Golanski 97] demonstram que a HEA pode ser utilizada para estudar geometrias reais complexas. Existem também alguns algoritmos de geração de posições e dimensões de partículas de reforço em células unitárias, normalmente baseados em esquemas de adsorção sequencial aleatória (*Random Sequential Adsorption*) ou em métodos de Monte Carlo [Böhm 02].

O método da homogeneização por expansão assintótica é ainda indicado para cálculos em regime inelástico. Através do processo de localização, é possível determinar o comportamento da microescala com base nos resultados da macroescala. Pode-se assim actualizar

o comportamento da microescala e proceder a uma nova homogeneização em cada passo de cálculo. Em rigor, esta é a vantagem mais evidente do método de homogeneização por expansão assintótica em relação a outros métodos de homogeneização [Chung 99b]. Estudos recentes expandem ainda as aplicações para problemas dinâmicos. No entanto, a dependência funcional da variável tempo introduz complexidades acrescidas em termos de homogeneização.

1.4 Objectivos

Atendendo às considerações referidas nas secções anteriores, os objectivos essenciais deste trabalho são:

- i) Caracterizar propriedades mecânicas de materiais compósitos de matriz metálica (CMM) partindo das suas particularidades e topologias microestruturais;
- ii) Determinar a influência de factores como, por exemplo, as propriedades e distribuição dos materiais constituintes nas propriedades efectivas de materiais compósitos;
- iii) Aplicar modelos de homogeneização numérica multiescala para caracterizar os materiais acima referidos;
- iv) Desenvolver metodologias que optimizem a aplicação de condições de fronteira de periodicidade no modelo de célula representativa unitária.

A estes objectivos acrescentam-se aqueles que dizem respeito ao desenvolvimento de ferramentas computacionais dedicadas. Assim, todo o trabalho evolui em torno de análises numéricas tridimensionais pelo método dos elementos finitos, em regime linear elástico, efectuadas com um código desenvolvido e implementado especificamente para este efeito.

1.5 Guia de Leitura

O presente trabalho está dividido em duas partes distintas. Da primeira, intitulada **Modelação Matemática e Numérica**, fazem parte os primeiros cinco capítulos, onde se pretende descrever a base teórica das metodologias necessárias para sustentar a obtenção e interpretação dos resultados obtidos. Neste contexto, no Capítulo 2 revêm-se alguns conceitos da mecânica dos meios contínuos. Focam-se as relações elementares entre tensão e deformação em meios sólidos elásticos e isotrópicos e apresentam-se alguns conceitos de elasticidade anisotrópica. Estabelecem-se também limites teóricos para associações de constituintes em materiais compósitos.

No Capítulo 3 descrevem-se os fundamentos matemáticos inerentes à aplicação da metodologia de homogeneização por expansão assintótica em problemas de elasticidade linear.

No Capítulo 4 expõem-se os princípios básicos da formulação do método dos elementos finitos aplicados à mecânica dos meios contínuos e apresentam-se alguns métodos controlar as condições de fronteira de periodicidade, necessárias à aplicação das estratégias de homogeneização utilizadas.

No Capítulo 5, descrevem-se as características essenciais das ferramentas de cálculo numérico desenvolvidas, com especial destaque para o programa 3DFRAN.

A segunda parte do trabalho, intitulada **Resultados**, é constituída por dois capítulos. No Capítulo 6 apresentam-se os resultados obtidos. Descrevem-se ensaios de tracção, corte, flexão e concentração de tensões. São realizados testes de processamento com o método do Gradiente Conjugado, quer em série quer em paralelo. Apresentam-se ainda várias simulações numéricas de aplicação da metodologia da homogeneização por expansão assintótica, com ensaios de validação, estudos de influência da fracção volúmica de reforço nas propriedades efectivas do material compósito e ensaios multiescala. Por fim, no Capítulo 7, apresentam-se as conclusões gerais retiradas deste trabalho, assim como algumas perspectivas de trabalho futuro.

Este texto inclui ainda um anexo relativo à notação, nomenclatura e siglas utilizadas.

Capítulo 2

Modelo Mecânico

2.1 Introdução

No presente capítulo revêm-se alguns conceitos da mecânica dos meios contínuos. Em particular, focam-se as relações elementares entre tensão e deformação em meios sólidos com comportamento elástico e isotrópico. Apresentam-se também alguns conceitos de elasticidade anisotrópica, dando especial ênfase aos casos particulares de ortotropia.

2.2 Elasticidade Isotrópica

Neste trabalho assume-se que um material elástico é homogêneo e contínuo. O material é também isotrópico, *i.e.* as suas propriedades elásticas são independentes da direcção considerada. Os pressupostos da teoria da elasticidade baseados na homogeneidade e isotropia podem, na prática, ser aplicados a materiais com uma componente de comportamento elástico como, por exemplo, os aços [Timoshenko 70].

2.2.1 Equilíbrio Estático

Em grande parte dos materiais metálicos, as deformações lineares no domínio elástico são muito pequenas, frequentemente inferiores a 1%. Consequentemente, neste trabalho, considera-se válida a teoria das pequenas deformações [Timoshenko 70, Dowling 99].

Neste contexto, considere-se o estado de tensão num ponto, definido através das componentes normais σ e de corte τ . Num referencial cartesiano ortonormado $Oxyz$, este estado pode ser definido pelo tensor de segunda ordem

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

designado por tensor das tensões de Cauchy. Por vezes, nas aplicações da teoria das tensões a materiais isotrópicos interessa distinguir a componente do tensor das tensões que provoca variação de volume do material em que está instalado da componente que provoca alterações na forma do mesmo. A variação de volume resulta da actuação do

tensor isotrópico ou hidrostático

$$\begin{bmatrix} \sigma_m & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_m & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_m \end{bmatrix}, \quad \text{com} \quad \sigma_m = \frac{\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{3}. \quad (2.2)$$

Por este motivo, é frequente decompor o tensor das tensões de Cauchy nas suas componentes hidrostática e desviadora, isto é, na forma

$$\begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_m & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_m & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_x - \sigma_m & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y - \sigma_m & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z - \sigma_m \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

De uma maneira geral, em materiais isotrópicos estas duas componentes do estado de tensão provocam deformações com características diferentes [Silva 99].

O estado de deformação num ponto de um sólido deformável contínuo pode ser definido pelo tensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} & \gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

As componentes lineares de deformação são definidas como

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{e} \quad \varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z}, \quad (2.5)$$

em que u , v e w são as componentes do vector de deslocamento no ponto considerado segundo Ox , Oy e Oz , respectivamente. Por sua vez, as componentes angulares da deformação expressam-se como

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \gamma_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \quad \text{e} \quad \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}. \quad (2.6)$$

Os gradientes de tensão, ao longo de incrementos infinitesimais dx , dy e dz , têm de satisfazer as condições de equilíbrio. Se as componentes de força volúmica forem b_x , b_y e b_z , as equações de equilíbrio do corpo podem escrever-se como [Timoshenko 70]

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + b_x = 0 \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + b_y = 0 \\ \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + b_z = 0 \end{cases}. \quad (2.7)$$

As condições de fronteira podem ser definidas por

$$\begin{Bmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{n}}, \quad (2.8)$$

em que t_x , t_y e t_z são as componentes de força de superfície por unidade de área e $\hat{\mathbf{n}}$ é o versor normal exterior à superfície em cada ponto. Para determinar o estado de tensão

num corpo sujeito a um determinado conjunto de forças externas é necessário calcular a solução do sistema de equações 2.7 constrangido pelas condições de fronteira de Neumann (relações 2.8) ou por condições de deslocamento prescrito, normalmente designadas de condições de fronteira de Dirichlet.

No referencial cartesiano $Oxyz$, as componentes do tensor das deformações ϵ são determinadas, a partir das componentes de deslocamento, u , v e w , pelas equações 2.5 e 2.6. Estas podem ser organizadas de forma matricial do seguinte modo:

$$\begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix}. \quad (2.9)$$

As componentes de deformação encontram-se ainda relacionadas pelas relações [Timoshenko 70]

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y}, \\ \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial y \partial z}, \\ \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial x \partial z}, \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y \partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{xz}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right), \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial x \partial z} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} - \frac{\partial \gamma_{xz}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right) \text{ e} \\ 2 \frac{\partial^2 \epsilon_z}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{xz}}{\partial y} - \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

A estas seis relações diferenciais, necessárias para que se garanta a unicidade do campo de deslocamentos, dá-se o nome de condições de compatibilidade.

2.2.2 Lei de Hooke Generalizada

Para definir completamente um problema de equilíbrio estático é ainda necessário estabelecer o modelo constitutivo, que traduz a relação entre os estados de tensão e deformação [Doghri 00]. Se o comportamento do material for linear elástico, a tensão relaciona-se linearmente com a deformação. Adicionalmente, se o material for isotrópico, apenas duas constantes independentes são necessárias para caracterizar o comportamento mecânico linear elástico, pelo que uma das constantes, E , ν ou G , é matematicamente dependente das restantes [Dowling 99]. A primeira destas constantes, designada por módulo de elasticidade (ou módulo de Young), pode ser definida pela expressão

$$E = \frac{\sigma_x}{\epsilon_x} \quad (2.11)$$

e representa o declive da relação $\sigma_x = \sigma_x(\varepsilon_x)$, correspondente à Lei de Hooke para o estado uniaxial de tensão. A segunda constante é o coeficiente de Poisson, ν , que relaciona a deformação transversal com a deformação na direcção de solicitação, isto é,

$$\nu = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_x}. \quad (2.12)$$

Substituindo ε_x da equação 2.12 na relação 2.11 obtém-se

$$\sigma_x = -\frac{E}{\nu}\varepsilon_y = -\frac{E}{\nu}\varepsilon_z. \quad (2.13)$$

Estas relações são válidas em quaisquer outras direcções e podem ser generalizadas para uma análise tridimensional. Sobrepondo o efeito das três componentes axiais de tensão e invertendo as equações 2.13, resulta

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)], \\ \varepsilon_y &= \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)] \quad \text{e} \\ \varepsilon_z &= \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

As deformações angulares relacionam-se com as tensões de corte de acordo com

$$\gamma_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{G}, \quad \gamma_{yz} = \frac{\tau_{yz}}{G} \quad \text{e} \quad \gamma_{xz} = \frac{\tau_{xz}}{G}, \quad (2.15)$$

em que G é o módulo de elasticidade transversal (ou módulo de corte), dado por

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (2.16)$$

Conjugando as relações anteriores e reescrevendo-as na forma matricial, obtém-se a lei de Hooke generalizada para o caso tridimensional,

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2.17)$$

em que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \left\{ \sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{xz} \right\}^T, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \left\{ \varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \varepsilon_z \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{xz} \right\}^T. \end{aligned} \quad (2.18)$$

A matriz constitutiva ou matriz de elasticidade, \mathbf{D} , é

$$\mathbf{D} = \frac{E(1 - \nu)}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Invertendo a relação constitutiva 2.17, pode escrever-se que

$$\varepsilon = \mathbf{S}\sigma, \quad (2.20)$$

em que $\mathbf{S} = \mathbf{D}^{-1}$ é a matriz de flexibilidade, dada por

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

2.3 Elasticidade Anisotrópica

Para grande parte dos materiais compósitos de engenharia, as propriedades dos materiais são de tal forma dependentes das direcções consideradas que assumir um comportamento isotrópico não constitui sequer uma aproximação razoável. Neste sentido, é necessário generalizar as relações entre tensão e deformação para o caso anisotrópico.

No caso tridimensional existem seis componentes de tensão e seis componentes de deformação. Em termos matemáticos, no caso dos materiais anisotrópicos, qualquer componente de tensão pode influenciar qualquer uma das seis componentes de deformação. Consequentemente, a matriz de elasticidade \mathbf{D} assume a forma genérica

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & D_{14} & D_{15} & D_{16} \\ & D_{22} & D_{23} & D_{24} & D_{25} & D_{26} \\ & & D_{33} & D_{34} & D_{35} & D_{36} \\ & & & D_{44} & D_{45} & D_{46} \\ & \text{sim.} & & & D_{55} & D_{56} \\ & & & & & D_{66} \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Não só existe uma maior quantidade de constantes D_{ij} , como os seus valores dependem da orientação do sistema de coordenadas considerado. De facto, no caso geral de anisotropia, cada componente D_{ij} corresponde a um valor não-nulo. Consequentemente, mantendo-se a simetria da matriz, existem 21 constantes elásticas independentes.

No entanto, se o material possuir simetria de propriedades elásticas relativamente a três planos ortogonais (planos de simetria material), obtém-se um caso particular de anisotropia, designado por ortotropia. Formalmente, embora a matriz de elasticidade dos materiais ortotrópicos se assemelhe ao caso isotrópico, verifica-se que é válida apenas para um sistema de coordenadas característico, definido por eixos orientados perpendicularmente a cada um dos planos de simetria material [Dowling 99]. Se este sistema de coordenadas for,

por exemplo, $Ox'y'z'$, a matriz de flexibilidade é

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{x'x'}} & \frac{-\nu_{y'x'}}{E_{y'y'}} & \frac{-\nu_{z'x'}}{E_{z'z'}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{x'y'}}{E_{x'x'}} & \frac{1}{E_{y'y'}} & \frac{-\nu_{z'y'}}{E_{z'z'}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{x'z'}}{E_{x'x'}} & \frac{-\nu_{y'z'}}{E_{y'y'}} & \frac{1}{E_{z'z'}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{x'y'}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{y'z'}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{x'z'}} \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

Alguns exemplos de materiais com este tipo de comportamento incluem os materiais compósitos reforçados com fibras alinhadas segundo direcções ortogonais. De acordo com a equação 2.23, verifica-se existir um módulo de Young segundo cada uma das direcções dos eixos ortogonais e um módulo de corte para cada plano de simetria material. Os coeficientes de Poisson são

$$\nu_{ij} = -\frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_i}, \quad (2.24)$$

relacionando a deformação transversal na direcção Oj com a deformação na direcção Oi , com $i \neq j$. Atendendo à simetria da matriz de flexibilidade verifica-se que

$$\frac{\nu_{ij}}{E_i} = \frac{\nu_{ji}}{E_j}. \quad (2.25)$$

Consequentemente, o número de coeficientes de Poisson reduz-se, neste caso, a três. Resultam assim nove constantes de elasticidade independentes, válidas apenas no referencial onde são definidas [Dowling 99].

Em particular, um material anisotrópico que apresente propriedades idênticas em cada uma das direcções Ox' , Oy' e Oz' designa-se por material cúbico. Este tipo de materiais caracteriza-se por apresentar simetria de propriedades elásticas relativamente a seis planos de simetria material adicionais, correspondentes aos planos bissectores dos quadrantes formados pelos planos $Ox'y'$, $Oy'z'$ e $Ox'z'$ [Fonseca 97]. Neste caso, o comportamento elástico do material define-se recorrendo a apenas três constantes independentes. Note-se que, por comparação com os materiais isotrópicos, os materiais cúbicos obrigam à definição de uma constante elástica suplementar. Consequentemente, as propriedades tornam-se dependentes de um sistema de coordenadas específico.

2.4 Propriedades Elásticas de Materiais Compósitos

2.4.1 Lei das Misturas

As propriedades mecânicas da generalidade dos materiais compósitos são intrinsecamente dependentes das proporções e propriedades individuais de cada um dos materiais constituintes. Neste contexto, introduzem-se os conceitos de fracção volúmica, f^v , e de fracção mássica, f^w , dos constituintes. Estas designações relacionam-se com o volume (V) e a

massa (W) do seguinte modo:

$$\begin{aligned} f_m^v &= \frac{V_m}{V_c} \quad \text{e} \quad f_r^v = \frac{V_r}{V_c}, \quad \text{e} \\ f_m^w &= \frac{W_m}{W_c} \quad \text{e} \quad f_r^w = \frac{W_r}{W_c}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

em que os subíndices m, r e c dizem respeito à matriz, ao reforço e ao material compósito, respectivamente. Note-se que

$$f_m^v + f_r^v = 1 \quad \text{e} \quad f_m^w + f_r^w = 1. \quad (2.27)$$

As fracções volúmicas e mássicas podem ser relacionadas com base na massa volúmica (ρ) de cada um dos materiais constituintes do material compósito. Assim, sendo

$$W_c = W_m + W_r \quad (2.28)$$

e atendendo a que $W = \rho V$, após a manipulação algébrica das relações anteriores, chega-se a

$$\rho_c = \rho_m f_m^v + \rho_r f_r^v. \quad (2.29)$$

Pode ainda constatar-se que

$$\frac{1}{\rho_c} = \frac{f_m^w}{\rho_m} + \frac{f_r^w}{\rho_r}, \quad (2.30)$$

assim como a relação geral

$$f_i^w = \frac{W_i}{W_c} = \frac{\rho_i V_i}{\rho_c V_c} = \frac{\rho_i f_i^v}{\rho_c}, \quad (2.31)$$

em que $i = m$ ou r . Deste modo, conhecendo as densidades dos materiais envolvidos, é possível converter fracções volúmicas em mássicas e vice-versa [Mathews 94].

A equação 2.29 mostra que a densidade do material compósito pode obter-se pela média ponderada das densidades dos materiais constituintes. Esta equação pode também ser aplicada à determinação de limites teóricos para algumas propriedades elásticas. Consequentemente, de forma genérica, pode escrever-se que

$$\psi_c = \psi_m f_m^v + \psi_r f_r^v, \quad (2.32)$$

em que ψ representa uma propriedade elástica genérica do material compósito [Teixeira-Dias 04]. Esta equação corresponde à forma mais comum da lei das misturas.

Porém, em muitos casos, a relação anterior não é suficiente para determinar adequadamente a generalidade das propriedades elásticas de um material compósito. De facto, verifica-se existir a influência de outros factores como, por exemplo, a natureza e propriedades da ligação matriz-reforço, a geometria, as dimensões, orientações e distribuições de reforço e, em matrizes policristalinas, a estrutura de grão da matriz. Estes factores, em conjunto com as fracções volúmicas, caracterizam a microestrutura do material compósito. No entanto, a fracção volúmica é o factor preponderante na determinação de propriedades

que dependam da microestrutura do material e que não obedeçam à lei das misturas. Por sua vez, os problemas de não-uniformidade na distribuição do reforço dão origem a zonas em que as fracções de cada um dos constituintes diferem dos valores globais, com os inerentes desequilíbrios em termos das propriedades mecânicas [Mathews 94]. A homogeneidade na distribuição do reforço é uma característica muito importante, determinando até que ponto é plausível definir volumes representativos do material e, conseqüentemente, das suas propriedades mecânicas.

2.4.2 Associação de Materiais em Paralelo

Considere-se o material compósito de camadas representado esquematicamente na figura 2.1, em que DS é a direcção de solicitação. Deste modo, segundo a direcção de solicitação, a associação dos constituintes do material é feita em paralelo. Um exemplo comum deste tipo de associação corresponde ao de materiais compósitos reforçados com fibras contínuas orientadas uniaxialmente e solicitados na direcção das fibras.

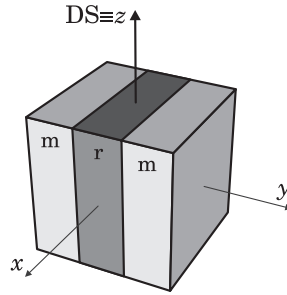


Figura 2.1: Associação de constituintes de um material compósito em paralelo segundo Oz . DS é a direcção de solicitação.

Sejam ambos os constituintes materiais isotrópicos cujas propriedades elásticas se distinguem pelos índices m e r . O material compósito é referenciado pelo índice c . Assumindo que há coesão perfeita na interface dos materiais, a deformação na direcção de solicitação (DS), ε_z , é idêntica para ambos os constituintes, *i.e.*

$$\varepsilon_c = \varepsilon_m = \varepsilon_r. \quad (2.33)$$

Considerando que são constantes as áreas das secções transversais dos constituintes (plano Oxy), designadas por A_m e A_r , a área resistente total é

$$A_c = A_m + A_r. \quad (2.34)$$

Nestes pressupostos, uma força aplicada na direcção DS origina reacções aditivas nos dois constituintes, pelo que

$$\sigma_c A_c = \sigma_m A_m + \sigma_r A_r, \quad (2.35)$$

em que σ_m e σ_r são as tensões internas na matriz e no reforço, respectivamente. Os módulos de elasticidade podem ser expressos por

$$E_c = \frac{\sigma_c}{\varepsilon_c}, \quad E_m = \frac{\sigma_m}{\varepsilon_m} \quad \text{e} \quad E_r = \frac{\sigma_r}{\varepsilon_r}. \quad (2.36)$$

Substituindo as equações 2.33 e 2.36 em 2.35, o módulo de elasticidade do material compósito, E_c , resulta

$$E_c = \frac{E_m A_m + E_r A_r}{A_c}, \quad (2.37)$$

em que as razões A_m/A_c e A_r/A_c são as fracções volúmicas de matriz e de reforço, f_m^v e f_r^v , respectivamente. A equação anterior pode ser reescrita como

$$E_c = E_m f_m^v + E_r f_r^v, \quad (2.38)$$

confirmando uma das aplicações da lei das misturas à determinação de propriedades elásticas médias de materiais compósitos [Mathews 94, Dowling 99]. A relação 2.38, correspondente a uma associação de rigidez em paralelo — modelo de isodeformação —, estabelece um limite teórico superior para associações genéricas de constituintes em materiais compósitos.

2.4.3 Associação de Materiais em Série

Considere-se agora o mesmo material compósito reorientado em relação à direcção de solicitação (DS), conforme se mostra na figura 2.2.

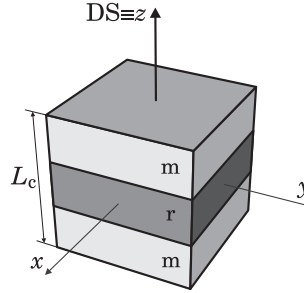


Figura 2.2: Associação de constituintes de um material compósito em série segundo Oz . DS é a direcção de solicitação.

Como se viu anteriormente, o caso de associação de materiais em paralelo caracteriza-se pela igualdade de deformações (ver relação 2.33). Porém, numa associação em série, são as intensidades das forças em cada constituinte que são idênticas. Consequentemente, sendo a área da secção transversal (plano Oxy) constante, esta condição resulta em

$$\sigma_c = \sigma_m = \sigma_r. \quad (2.39)$$

A espessura total do material compósito, L_c , obtém-se somando as espessuras dos seus constituintes, L_m e L_r , *i.e.* $L_c = L_m + L_r$. As variações destas espessuras podem ser utilizadas para calcular as deformações, de tal modo que

$$\varepsilon_c = \frac{\Delta L_c}{L_c}, \quad \varepsilon_m = \frac{\Delta L_m}{L_m} \quad \text{e} \quad \varepsilon_r = \frac{\Delta L_r}{L_r}, \quad (2.40)$$

em que

$$\Delta L_c = \Delta L_m + \Delta L_r. \quad (2.41)$$

Substituindo as relações 2.40 em 2.41 obtém-se

$$\varepsilon_c = \frac{\varepsilon_m L_m + \varepsilon_r L_r}{L_c}. \quad (2.42)$$

Considerando as equações 2.36 e uma vez que as tensões em cada um dos constituintes são idênticas, a equação anterior pode reescrever-se como

$$\frac{1}{E_c} = \frac{L_m}{E_m L_c} + \frac{L_r}{E_r L_c}. \quad (2.43)$$

Nesta expressão, as razões L_m/L_c e L_r/L_c são as fracções volúmicas de matriz e de reforço, f_m^v e f_r^v , respectivamente. Consequentemente, a equação anterior pode ser reescrita como

$$\frac{1}{E_c} = \frac{f_m^v}{E_m} + \frac{f_r^v}{E_r}, \quad (2.44)$$

ou ainda

$$E_c = \frac{E_m E_r}{f_m^v E_r + f_r^v E_m}. \quad (2.45)$$

A relação 2.45, correspondente a uma associação de rigidez em série — modelo de isotensão —, estabelece um limite teórico inferior para associações genéricas de constituintes em materiais compósitos.

Capítulo 3

Homogeneização por Expansão Assimptótica em Elasticidade Linear

A modelação numérica detalhada do comportamento mecânico de componentes estruturais feitos de materiais compósitos envolve, em geral, custos computacionais demasiadamente elevados. Neste contexto, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos. Estas técnicas permitem substituir um meio heterogéneo por um meio homogéneo equivalente, possibilitando assim a obtenção de leis de comportamento macroestruturais a partir de informação relativa ao nível microestrutural.

Por outro lado, os materiais compósitos são geralmente caracterizados por apresentarem heterogeneidades cujas dimensões características se revelam bastantes inferiores às dimensões características dos componentes estruturais em que são utilizados. Se as heterogeneidades se encontram distribuídas de um modo equitativo no seio da matriz, a morfologia das heterogeneidades pode ser geralmente aproximada pela repetição periódica de uma célula unitária representativa dos detalhes microestruturais do material compósito.

Neste contexto, o método da homogeneização por expansão assimptótica é uma técnica expedita de abordagem a problemas de modelação de fenómenos físicos em meios com estrutura periódica. Em particular, é uma técnica útil na modelação do comportamento mecânico de componentes estruturais construídos em materiais compósitos. Em termos numéricos, as principais vantagens desta metodologia consistem no facto de (i) permitir uma redução significativa do número de graus de liberdade associados à modelação do comportamento mecânico deste tipo de estruturas e (ii) permitir a caracterização dos campos microestruturais de tensão e de deformação. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos usuais de homogeneização, esta técnica permite obter explicitamente equações que permitem proceder à determinação dos níveis microestruturais de tensão ou deformação. Este processo, designado por localização, corresponde, em termos genéricos, ao processo inverso da homogeneização.

O conceito da homogeneização de propriedades físicas remonta ao século XIX [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892]. No entanto, os primeiros trabalhos referentes à teoria matemática da homogeneização datam do princípio dos anos 70 do século XX [Spagnolo 68, Sanchez-Palencia 70, De Giorgi 73]. Desde então que diversas técnicas de homogeneização têm vindo a surgir, das quais se destaca a homogeneização por expansão assimptótica [Bensoussan 78, Sanchez-Palencia 80]. Esta técnica permite a obtenção

de valores médios (homogeneizados) para as propriedades mecânicas de um determinado material compósito. No entanto, no caso da microestrutura não poder ser considerada como periódica, não será possível aplicar o método de homogeneização por expansão assintótica. Neste caso, dever-se-ão utilizar outras técnicas de homogeneização, tais como, por exemplo, a convergência-G [Spagnolo 68] — para problemas simétricos e não-periódicos —, a convergência-H [Murat 97] — para problemas não-simétricos e não-periódicos — e a convergência- Γ [Dal Maso 93] — para problemas que admitem uma caracterização variacional. No entanto, salienta-se o facto de estas técnicas não permitirem a obtenção de valores homogeneizados para as propriedades mecânicas de um determinado material compósito. De facto, estas metodologias permitem apenas estimar limites superiores e inferiores para os valores homogeneizados das referidas propriedades.

Neste capítulo abordam-se os principais aspectos relativos à aplicação da técnica da homogeneização assintótica ao problema de elasticidade linear. Tecem-se ainda algumas considerações acerca da natureza dos termos de ordem superior associados à expansão assintótica do campo de deslocamentos. Por fim, referem-se algumas considerações sobre o processo de localização em elasticidade linear.

3.1 Formulação Diferencial do Problema de Elasticidade

Considere-se um material heterogêneo linear elástico associado a uma região material Ω . A sua microestrutura é constituída pela distribuição espacialmente periódica de uma célula representativa unitária associada a uma região Y , conforme ilustrado na figura 3.1. A generalidade dos materiais heterogêneos de microestrutura periódica apresenta uma relação ϵ entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroescala reduzida ($\epsilon \ll 1$). Assim, verifica-se que, aquando da solicitação mecânica destes materiais, surgem oscilações periódicas dos campos resultantes de deslocamentos, tensões ou deformações. Estas oscilações advêm da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural e manifestam-se na vizinhança de dimensão ϵ de qualquer ponto de Ω . Neste contexto, é natural assumir a existência de duas escalas distintas \mathbf{x} e \mathbf{y} , associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , respectivamente (ver figura 3.1). Deste modo, as variáveis associadas aos campos anteriormente referidos passam a depender funcionalmente de ambos os sistemas \mathbf{x} e \mathbf{y} , em que

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}/\epsilon. \quad (3.1)$$

Resulta ainda do exposto que a dependência funcional em \mathbf{y} é periódica no domínio Y . Esta característica é usualmente designada por Y -periodicidade. Em termos de propriedades lineares elásticas, a Y -periodicidade da heterogeneidade microestrutural reflecte-se no facto de o tensor de elasticidade \mathbf{D} ser Y -periódico em \mathbf{y} . Por outro lado, a homogeneidade do material ao nível da macroescala resulta na não-depedência directa do tensor de elasticidade do sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} . Neste contexto, em termos das componentes do tensor de elasticidade, obtém-se

$$D_{ijkl} = D_{ijkl}(\mathbf{y}). \quad (3.2)$$

No entanto, no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} , a heterogeneidade microestrutural manifesta-se num período ϵ^{-1} vezes menor do que a dimensão característica do

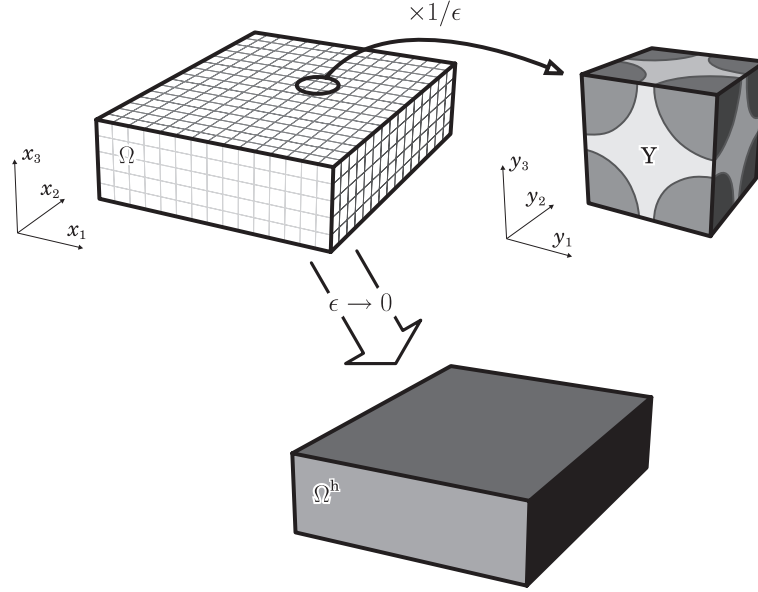


Figura 3.1: Representação esquemática do material elástico heterogêneo Ω e da célula representativa unitária Y associada à microescala, utilizada no processo de homogeneização assintótica que resulta, com $\epsilon \rightarrow 0$, no material homogêneo Ω^h .

domínio Y . Este facto é denotado, de acordo com a equação 3.1, por

$$D_{ijkl}^\epsilon(\mathbf{x}) = D_{ijkl}(\mathbf{x}/\epsilon), \quad (3.3)$$

em que o superíndice ϵ evidencia o facto de \mathbf{D} ser ϵY -periódico no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} , dependendo, assim, indirectamente de \mathbf{x} . Assumindo deformações infinitesimais associadas a um estado de equilíbrio estático e considerando a convenção de Einstein para a notação tensorial¹, o problema de elasticidade linear é descrito por equações de equilíbrio, relações deformação-deslocamento linearizadas e relações constitutivas que correspondem, respectivamente, a [Cioranescu 99]

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} + f_i = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (3.4)$$

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} + \frac{\partial u_j^\epsilon}{\partial x_i^\epsilon} \right) \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (3.5)$$

$$\sigma_{ij}^\epsilon = D_{ijkl}^\epsilon \varepsilon_{kl}^\epsilon \quad \text{em } \Omega, \quad (3.6)$$

para $i, j, k, l \in \{1, 2, 3\}$. σ_{ij} e ε_{ij} são as componentes dos tensores das tensões de Cauchy e das deformações, respectivamente. f_i e u_i representam as componentes dos vectores de forças volúmicas e de deslocamentos, respectivamente. O superíndice ϵ evidencia a ϵY -periodicidade de uma determinada variável no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} .

¹No presente capítulo, de modo a tornar mais expedita a exposição da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica ao problema da elasticidade linear utiliza-se, sempre que necessário, a notação tensorial, sendo, neste contexto, adoptada a convenção de Einstein.

A fronteira de Ω é definida, de modo disjunto, pelas superfícies Γ_u e Γ_t . Estas superfícies encontram-se associadas a condições de fronteira de Dirichlet e Neumann definidas por

$$u_i^\epsilon = \bar{u}_i \quad \text{em } \Gamma_u \quad \text{e} \quad (3.7)$$

$$\sigma_{ij}^\epsilon n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_t, \quad (3.8)$$

respectivamente. \bar{u}_i e \bar{t}_i são valores prescritos de deslocamento e de força superficial, respectivamente. n_j são as componentes do versor normal exterior à superfície Γ_t .

De acordo com o que foi anteriormente referido, devido ao facto de o material heterogêneo ser constituído por $n > 1$ materiais homogêneos, o problema de elasticidade linear consiste em n equações análogas à equação 3.4 associadas a condições de continuidade de deslocamento e de forças superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios. No entanto, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, estas equações serão omitidas no seguimento deste trabalho.

3.2 Expansão Assimptótica do Campo de Deslocamentos

No pressuposto da existência de duas escalas distintas associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , procede-se à aproximação do campo de deslocamentos com base na seguinte expansão assimptótica em ϵ :

$$u_i^\epsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 u_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots, \quad (3.9)$$

em que os termos $u_i^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, com $r \in \mathbb{N}_0$, correspondem a funções Y -periódicas em \mathbf{y} , designados por correctores de ordem r do campo de deslocamentos. Atendendo a que $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\epsilon$, tem-se, de acordo com a regra da cadeia utilizada na derivação de funções, que

$$\frac{\partial \cdot}{\partial x_i^\epsilon} = \frac{\partial \cdot}{\partial x_i} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \cdot}{\partial y_i}. \quad (3.10)$$

Neste contexto, substituindo a expansão assimptótica dos deslocamentos (expressão 3.9) nas relações deformação-deslocamento (expressão 3.5), utilizando as relações 3.10, manipulando adequadamente os índices e reagrupando as potências de ϵ , obtém-se

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon = \epsilon^{-1} \varepsilon_{ij}^{(0)} + \epsilon^0 \varepsilon_{ij}^{(1)} + \epsilon^1 \varepsilon_{ij}^{(2)} + \dots, \quad (3.11)$$

em que,

$$\varepsilon_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^{(0)}}{\partial y_i} \right) \quad \text{e} \quad (3.12)$$

$$\varepsilon_{ij}^{(r)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{(r-1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{(r-1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i^{(r)}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^{(r)}}{\partial y_i} \right), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (3.13)$$

A substituição da expressão 3.11 nas equações constitutivas (expressão 3.6) e a consideração das equações 3.1 e 3.3 permitem, após a manipulação adequada dos índices, a obtenção de

$$\sigma_{ij}^\epsilon = \epsilon^{-1} \sigma_{ij}^{(0)} + \epsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \epsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \dots, \quad (3.14)$$

em que, de acordo com as expressões 3.12 e 3.13, se tem

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial y_l} + \frac{\partial u_l^{(0)}}{\partial y_k} \right) \quad \text{e} \quad (3.15)$$

$$\sigma_{ij}^{(r)} = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(r-1)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l^{(r-1)}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k^{(r)}}{\partial y_l} + \frac{\partial u_l^{(r)}}{\partial y_k} \right), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (3.16)$$

Substituindo a expressão 3.14 nas equações de equilíbrio (expressão 3.4), utilizando as relações 3.10 e reagrupando as potências de ϵ , obtém-se

$$\epsilon^{-2} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial y_j} + \epsilon^{-1} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} \right) + \epsilon^0 \left(\frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} + f_i \right) + \dots = 0. \quad (3.17)$$

Uma vez que as equações anteriores são válidas para qualquer $\epsilon \rightarrow 0$, é necessário que qualquer dos coeficientes das potências de ϵ seja nulo. Assim, obtém-se para as várias potências de ϵ , *i.e.* para as diversas ordens de correcção, o seguinte conjunto inumerável de equações diferenciais:

$$\epsilon^{-2} \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial y_j} = 0, \quad (3.18)$$

$$\epsilon^{-1} \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} = 0, \quad (3.19)$$

$$\epsilon^0 \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} + f_i = 0 \quad \text{e} \quad (3.20)$$

$$\epsilon^r \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(r+1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(r+2)}}{\partial y_j} = 0, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (3.21)$$

Considerando as expansões assintóticas 3.9 e 3.14, as condições de fronteira de Dirichlet (expressão 3.7) e de Neumann (expressão 3.8) do problema original correspondem a

$$\epsilon^0 u_i^{(0)} + \epsilon^1 u_i^{(1)} + \epsilon^2 u_i^{(2)} + \dots = \bar{u}_i \quad \text{e} \quad (3.22)$$

$$\left(\epsilon^{-1} \sigma_{ij}^{(0)} + \epsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \epsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \dots \right) n_j = \bar{t}_i, \quad (3.23)$$

respectivamente. Assim, as condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann associadas às diversas ordens de correcção são

$$\epsilon^0 \Rightarrow u_i^{(0)} = \bar{u}_i \quad \text{e} \quad (3.24)$$

$$\epsilon^r \Rightarrow u_i^{(r)} = 0, \quad r \in \mathbb{N}, \quad \text{e} \quad (3.25)$$

$$\epsilon^{-1} \Rightarrow \sigma_{ij}^{(0)} n_j = 0, \quad (3.26)$$

$$\epsilon^0 \Rightarrow \sigma_{ij}^{(1)} n_j = \bar{t}_i \quad \text{e} \quad (3.27)$$

$$\epsilon^r \Rightarrow \sigma_{ij}^{(r+1)} n_j = 0, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (3.28)$$

Atenda-se ao facto de as soluções das equações diferenciais definidas pelas expressões 3.18 a 3.21 e associadas às condições de fronteira correspondentes às expressões 3.24 a 3.28 poderem ser obtidas por recorrência. Na realidade, obtendo as soluções $\sigma_{ij}^{(0)}$ das equações 3.18 é possível, por substituição nas equações 3.19, determinar as soluções $\sigma_{ij}^{(1)}$ em termos de $\sigma_{ij}^{(0)}$. Esta metodologia pode ser utilizada de modo recursivo. Obtêm-se assim as soluções para as equações relativas a uma determinada ordem de correcção recorrendo às soluções das equações associadas a ordens superiores.

3.3 Equações Diferenciais da Microescala

Analizando as equações diferenciais associadas à ordem de correcção -2 do campo de tensão (expressão 3.18), verifica-se que

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (3.29)$$

No entanto, considerando a expressão 3.15 e atendendo à simetria do tensor de elasticidade, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(0)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial y_l}, \quad (3.30)$$

pelo que as condições 3.29 e 3.30 resultam em [Sanchez-Hubert 92]

$$\sigma_{ij}^{(0)} = 0 \quad \text{e} \quad (3.31)$$

$$u_i^{(0)} = u_i^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (3.32)$$

Deste modo, constata-se que o deslocamento $u_i^{(0)}$ é independente da coordenada \mathbf{y} da microescala, correspondendo ao deslocamento global do material homogeneizado associado à macroescala. Neste contexto, substituindo a expressão 3.31 nas equações diferenciais associadas à ordem de correcção -1 do campo de tensão (relação 3.19) obtém-se

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} = 0. \quad (3.33)$$

Considerando a expressão 3.16 para $r = 1$ e atendendo à simetria do tensor de elasticidade, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(1)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_l} \right), \quad (3.34)$$

pelo que as equações 3.33 correspondem a

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_l} \right) \right] = 0. \quad (3.35)$$

O facto de o termo $\partial u_k^{(0)} / \partial x_l$ da expressão 3.35 ser uma constante relativamente aos operadores $\partial \cdot / \partial y_j$ (ver equações 3.32) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir as seguintes soluções para as equações 3.35:

$$u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\chi_i^{kl} \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}). \quad (3.36)$$

$\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x})$ são constantes de integração em \mathbf{y} e χ_i^{kl} são as componentes Y-periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos. Substituindo as equações 3.36 na expressão 3.34, reajustando os índices mudos e pondo em evidência os factores comuns às parcelas do segundo membro, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(1)} = \hat{\sigma}_{ij}^{mn} \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n}, \quad (3.37)$$

em que

$$\hat{\sigma}_{ij}^{mn} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \quad (3.38)$$

são funções Y-periódicas, em que

$$\Gamma_{kl}^{mn} = \delta_{km} \delta_{ln}. \quad (3.39)$$

δ_{ij} é o símbolo de delta de Kronecker. Atendendo às equações 3.32, a substituição das equações 3.37 na expressão 3.33 resulta em

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{mn}}{\partial y_j} \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} = 0. \quad (3.40)$$

A arbitrariedade do segundo factor do primeiro membro das equações anteriores obriga a que o primeiro factor seja nulo. Assim, as equações diferenciais de equilíbrio da microescala podem escrever-se como

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{mn}}{\partial y_j} = 0 \quad (3.41)$$

ou, de acordo com a expressão 3.38, a

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl} \left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \right] = 0. \quad (3.42)$$

Deste modo, as componentes do tensor do campo de deslocamentos característicos correspondem às soluções $\chi_i^{kl} \in \tilde{V}_Y$ do problema variacional auxiliar

$$\int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y D_{ijmn} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \quad (3.43)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y-periódicas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y. O valor médio de uma função $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ Y-periódica em Y é definido por

$$\langle \Phi \rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY. \quad (3.44)$$

A exigência de valores médios nulos em Y para as soluções das equações 3.43 constitui uma condição de unicidade para o tensor χ do campo de deslocamentos característicos [Sanchez-Hubert 92].

3.4 Equações Diferenciais da Macroescala

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ — valor médio em Y — aos dois termos das equações diferenciais de equilíbrio associadas à ordem de correcção 0 do campo de tensão (expressão 3.20), obtém-se

$$\left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} \right\rangle_Y + \left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} \right\rangle_Y + \langle f_i \rangle_Y = 0. \quad (3.45)$$

De acordo com a definição de valor médio de uma função Y -periódica em Y e o teorema da divergência tem-se que

$$\left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} \right\rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\Gamma_Y} \sigma_{ij}^{(2)} n_j d\Gamma = 0, \quad (3.46)$$

atendendo à anti-simetria dos versores n_j em Γ_Y . Assim, devido ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_j$ e o vector de forças volúmicas, f_i , não depender de \mathbf{y} , tem-se, considerando a expressão 3.46, que a expressão 3.45 corresponde a

$$\frac{\partial \langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y}{\partial x_j} + f_i = 0. \quad (3.47)$$

Esta expressão representa as equações diferenciais de equilíbrio homogeneizadas da macroescala. Por outro lado, substituindo a expressão 3.38 na expressão 3.37 e aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$, obtém-se as relações constitutivas homogeneizadas:

$$\langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y = D_{ijmn}^h \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n}, \quad (3.48)$$

em que

$$D_{ijmn}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left[\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right] dY \quad (3.49)$$

são as componentes do tensor de elasticidade homogeneizado, \mathbf{D}^h . Por fim, integrando as equações 3.27 na superfície Γ_t e aplicando o teorema da divergência, tem-se que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i d\Gamma. \quad (3.50)$$

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ a ambos os membros das equações 3.50, atendendo ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_j$ e de o vector \bar{t}_i não depender de \mathbf{y} , obtém-se as equações

$$\langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_t, \quad (3.51)$$

que correspondem às condições de Neumann associadas às variáveis do problema definido pelas equações 3.47. Neste contexto, considerando

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y \quad (3.52)$$

e atendendo às equações 3.47, 3.24, 3.51 e 3.48, tem-se que o campo de deslocamentos $u_i^{(0)}$ corresponde à solução do problema de elasticidade homogeneizado definido por

$$\frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (3.53)$$

$$u_i^{(0)} = \bar{u}_i \quad \text{em } \Gamma_u, \quad (3.54)$$

$$\Sigma_{ij} n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_t, \quad \text{com} \quad (3.55)$$

$$\Sigma_{ij} = D_{ijkl}^h \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} \quad \text{em } \Omega, \quad (3.56)$$

em que as componentes D_{ijkl}^h do tensor de elasticidade homogeneizado se obtêm, após a resolução das equações diferenciais de equilíbrio da microescala (expressão 3.42) e a manipulação adequada dos índices, a partir das equações 3.49. Σ_{ij} é o campo de tensões macroestrutural homogeneizado.

Uma vez obtido o campo de deslocamentos $u_i^{(0)}$, as equações 3.36 permitem determinar, a menos de constantes aditivas, o campo de deslocamentos $u_i^{(1)}$. No entanto, a consideração das duas escalas \mathbf{x} e \mathbf{y} — associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , respectivamente — baseia-se, tal como foi referido na secção 3.1, na hipótese de existirem oscilações periódicas dos campos de deslocamentos resultantes, advindas da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural. Estas oscilações devem sobrepor-se a campos macroscópicos em que não se toma em consideração, pelo menos de modo directo, a influência de tais heterogeneidades microestruturais. Assim, as oscilações podem interpretar-se como flutuações em torno de um valor médio macroscópico (ver figura 3.2). Assim, as constantes $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x})$ de integração em \mathbf{y} do termo $u_i^{(1)}$ associado à expansão assintótica 3.9 do campo de deslocamentos podem, sem perda de generalidade, ser consideradas nulas, *i.e.* $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$. Deste modo, a metodologia apresentada permite definir uma aproximação $\tilde{u}_i^\epsilon(\mathbf{x})$ de primeira ordem, *i.e.* linear relativamente a ϵ , à expansão assintótica do campo de deslocamentos, $u_i^\epsilon(\mathbf{x})$ (ver figura 3.2), a que, de acordo com as expressões 3.9 e 3.32, corresponde

$$u_i^\epsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{u}_i^\epsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}) + \epsilon u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (3.57)$$

Substituindo a expressão 3.36 nas equações 3.57 e atendendo à hipótese $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$, obtêm-se as seguintes equações em função das componentes do tensor do campo de deslocamentos característico:

$$u_i^\epsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{u}_i^\epsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}) - \epsilon \chi_i^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l}(\mathbf{x}). \quad (3.58)$$

Devido ao carácter linear, em ϵ , da aproximação anterior, χ é usualmente designado como tensor do campo de deslocamentos característicos de primeira ordem.

3.5 Correctores de Deslocamento de Ordem Superior

Os correctores de ordem superior que constituem a expansão assintótica do campo de deslocamentos 3.9 podem obter-se, de acordo com o referido na secção 3.2, pela resolução

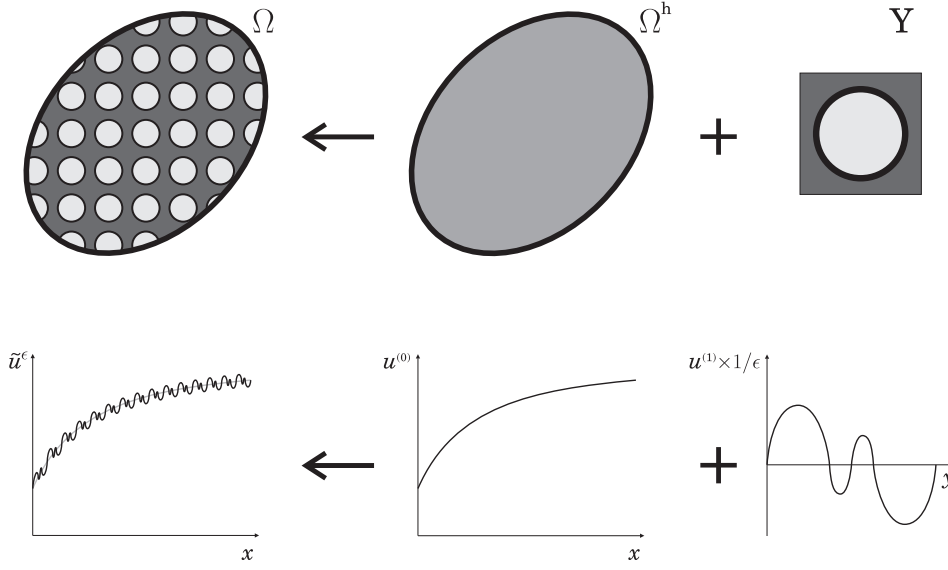


Figura 3.2: Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de deslocamentos, para um caso unidimensional: o campo de deslocamentos, em Ω , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em Ω^h , com as flutuações advindas da Y -periodicidade do campo da microescala, em Y .

recorrente das equações diferenciais associadas a ordens de correcção superiores. Neste contexto, considere-se, a título de exemplo, a obtenção do corrector de segunda ordem $u_i^{(2)}$ associado à expansão assintótica do campo de deslocamentos (expressão 3.9). Neste caso, devem ser resolvidas as equações 3.20 com base nas soluções $u_i^{(0)}$ e $u_i^{(1)}$ relativas às equações 3.18 e 3.19, respectivamente. Deste modo, considerando a expressão 3.16 com $r = 2$, atendendo à simetria do tensor de elasticidade e substituindo, em conjunto com a expressão 3.34, nas equações diferenciais de equilíbrio associadas à ordem de correcção 0 do campo de tensão (expressão 3.20), obtém-se

$$D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left[\frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k^{(1)}}{\partial x_j \partial y_l} \right] + \frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(2)}}{\partial y_l} \right) \right] + f_i = 0. \quad (3.59)$$

Por outro lado, substituindo a expressão 3.56 nas equações 3.53 e atendendo ao facto de o tensor de elasticidade homogeneizado \mathbf{D}^h ser constante, resulta que

$$f_i = -D_{ijkl}^h \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l}. \quad (3.60)$$

Substituindo as equações 3.36 (com $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$) e 3.60 nas equações 3.59, manipulando adequadamente os índices e reagrupando os vários termos, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(2)}}{\partial y_l} \right] = \bar{D}_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l}, \quad (3.61)$$

em que

$$\bar{D}_{ijkl} = D_{ijkl}^h - D_{ijkl}(\mathbf{y}) + D_{ijmn}(\mathbf{y}) \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} + \frac{\partial}{\partial y_n} \left[D_{inmj}(\mathbf{y}) \chi_m^{kl} \right]. \quad (3.62)$$

O facto de o termo $\partial^2 u_k^{(0)} / \partial x_j \partial x_l$ da expressão 3.61 ser constante em relação aos operadores $\partial \cdot / \partial y_j$ (ver equações 3.32) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir as seguintes soluções para as equações 3.61:

$$u_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\Theta_i^{kjl} \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l} + \bar{u}_i^{(2)}(\mathbf{x}). \quad (3.63)$$

$\bar{u}_i^{(2)}(\mathbf{x})$ são constantes de integração em \mathbf{y} e Θ_i^{klj} são as componentes Y-periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos de segunda ordem.

De acordo com as expressões 3.61 e 3.62, as componentes do tensor do campo de deslocamentos característicos de segunda ordem correspondem às soluções $\Theta_i^{klj} \in \tilde{V}_Y$ do problema variacional auxiliar

$$\begin{aligned} \int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \Theta_k^{mnp}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY &= \int_Y \left(D_{inmp}^h - D_{inmp} + D_{inkj} \frac{\partial \chi_k^{mp}}{\partial y_j} \right) v_i dY \\ &\quad - \int_Y D_{ijkn} \chi_k^{mp} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \end{aligned} \quad (3.64)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y-periódicas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y.

Procedendo de modo análogo é possível obter os restantes correctores de ordem superior da expansão assintótica do campo de deslocamentos 3.9. Atenda-se ao facto de, em geral, os correctores de ordem $k \in \mathbb{N}_0$ serem proporcionais a uma derivada parcial de ordem k do deslocamento global do material homogeneizado associado à macroescala, $u_i^{(0)}$. Os factores de proporcionalidade são as componentes do tensor do campo de deslocamentos característicos de ordem k . Neste contexto, assumindo ainda que as constantes de integração em \mathbf{y} para as ordens superiores são nulas, a expressão 3.9 resulta em

$$u_i^\epsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}) - \epsilon \chi_i^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l}(\mathbf{x}) - \epsilon^2 \Theta_i^{kjl}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l}(\mathbf{x}) - \dots \quad (3.65)$$

Embora o campo de deslocamentos u_i^ϵ seja definido por um conjunto inumerável de termos (ver expressão 3.65), verifica-se que, no caso da relação ϵ entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroescala ser reduzida ($\epsilon \ll 1$), os termos de ordem superior se revelam numericamente insignificantes face à aproximação de primeira ordem 3.58 [Terada 96].

3.6 Metodologia Convencional de Homogeneização

Na prática, verifica-se que uma parte significativa das aplicações estruturais de engenharia baseadas em materiais heterogêneos de microestrutura periódica se encontra associada a valores de $\epsilon \ll 1$. Nesta situação, tem-se, de acordo com o exposto na secção 3.5, que

a aproximação de primeira ordem do campo de deslocamentos se revela adequada para representar o campo de deslocamentos u_i^ε . Não considerar os termos de deslocamento de ordem superior simplifica a metodologia de homogeneização por expansão assintótica, resultando na metodologia convencional de homogeneização [Terada 96].

Atendendo ao exposto nas secções anteriores, a metodologia convencional de homogeneização consiste, em termos do problema de elasticidade, numa técnica matemática rigorosa. Com base nesta técnica, substitui-se a resolução de um problema associado a um operador diferencial parcial com coeficientes de variação periódica de elevada frequência espacial (ver equações 3.4 a 3.8) pela resolução de um problema associado a um operador diferencial parcial com coeficientes constantes (ver equações 3.53 a 3.56). Este é designado por problema de elasticidade homogeneizado. Por sua vez, os coeficientes do problema homogeneizado são determinados a partir da solução de um problema definido numa célula da microescala, cujas fronteiras se encontram associadas a condições de fronteira de periodicidade (ver equações 3.43 e 3.49).

Neste contexto e em termos numéricos, uma das principais vantagens desta metodologia consiste no facto de permitir uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à resolução do problema de elasticidade. De facto, esta técnica permite que a modelação das particularidades microestruturais seja efectuada com base numa única célula representativa unitária. Por outro lado, a macroescala é modelada como se de um meio homogéneo se tratasse.

3.7 Metodologia Convencional de Localização

Outra vantagem relevante do método de homogeneização por expansão assintótica consiste no facto de permitir a caracterização dos campos microestruturais de tensão e de deformação. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos usuais de homogeneização, o método de homogeneização por expansão assintótica permite a obtenção explícita de equações que permitem proceder à determinação dos níveis microestruturais de tensão ou deformação. Este processo, designado por localização, corresponde, em termos genéricos, ao processo inverso da homogeneização (ver figura 3.3).

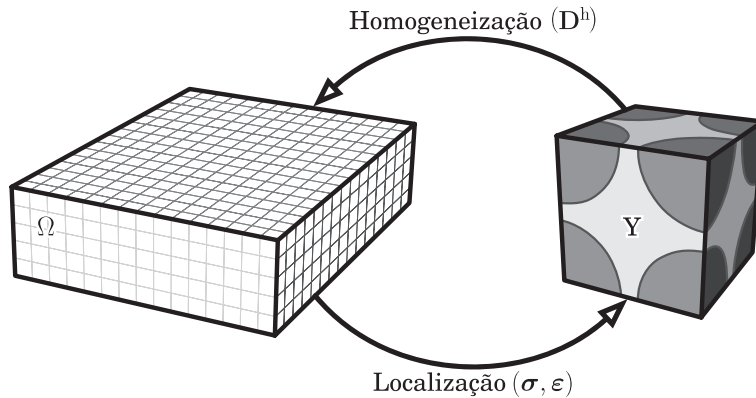


Figura 3.3: Ilustração esquemática dos fluxos de informação associados às técnicas de homogeneização e localização, que ocorrem entre a macroescala Ω e a microescala Y .

Atendendo às equações 3.12, 3.15 e 3.31 pode constatar-se que $\sigma_{ij}^{(0)} = 0$ e $\varepsilon_{ij}^{(0)} = 0$. Deste modo, os campos de tensão e deformação correspondem, de acordo com as expressões 3.14 e 3.11, a

$$\sigma_{ij}^\epsilon = \epsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \epsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \dots \quad \text{e} \quad (3.66)$$

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon = \epsilon^0 \varepsilon_{ij}^{(1)} + \epsilon^1 \varepsilon_{ij}^{(2)} + \dots, \quad (3.67)$$

respectivamente. As expressões 3.66 e 3.67 representam as expansões em série dos campos de tensão e deformação resultantes da Y-periodicidade da heterogeneidade microestrutural. No entanto, na metodologia convencional de homogeneização considera-se uma aproximação de primeira ordem em ϵ para o campo de deslocamentos (ver secção 3.6). Assim, de acordo com as relações 3.16 e 3.13 para $r = 1$, obtêm-se aproximações $\tilde{\sigma}_{ij}^\epsilon$ e $\tilde{\varepsilon}_{ij}^\epsilon$, de ordem zero em ϵ , para os campos de tensão e de deformação microestruturais, respectivamente. Estas aproximações correspondem a

$$\sigma_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{\sigma}_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \text{e} \quad (3.68)$$

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{\varepsilon}_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon^0 \varepsilon_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (3.69)$$

Assim, de acordo com as expressões 3.37 e 3.38, o campo microestrutural de tensão associado à metodologia convencional de localização (expressão 3.68) corresponde a

$$\sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(I_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n}. \quad (3.70)$$

Por outro lado, substituindo a expressão 3.36 nas equações 3.13 para $r = 1$ e manipulando adequadamente os índices, o campo microestrutural de deformação associado à metodologia convencional de localização (expressão 3.69) resulta em

$$\varepsilon_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = T_{ij}^{kl} \left(I_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n}, \quad (3.71)$$

em que

$$T_{ij}^{kl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (3.72)$$

As equações 3.70 e 3.71 permitem obter, para um determinado ponto da macroescala \mathbf{x} , os valores aproximados dos campos de tensão e de deformação no seio da microestrutura heterogénea. Pelo contrário, o campo de tensão macroestrutural homogeneizado Σ_{ij} , ao corresponder ao valor médio do campo de tensões microestruturais $\sigma_{ij}^{(1)}$ em Y (ver equação 3.52), revela-se incapaz de representar quaisquer flutuações microestruturais do campo de tensões.

3.8 Considerações Finais

No presente capítulo a aplicação do método da homogeneização por expansão assintótica ao problema de elasticidade linear é feita de modo formal. De facto, as várias funções

envolvidas são consideradas suficientemente regulares, o que, em geral, não se verifica. Na realidade, as componentes do tensor de elasticidade, D_{ijkl} , para um material compósito apresentam descontinuidades na interface matriz-reforço. Assim, embora a utilização da expansão assintótica do campo de deslocamentos 3.9 se revele útil na resolução do problema da homogeneização por expansão assintótica em elasticidade linear, a questão essencial reside no facto de a justificação rigorosa do método das múltiplas escalas requerer uma regularidade excessiva das funções envolvidas. Assim, o desenvolvimento matematicamente rigoroso da metodologia de homogeneização de equações diferenciais parciais com coeficientes não-regulares envolve a utilização de conceitos, tais como, por exemplo, o de convergência fraca. Neste contexto, o desenvolvimento rigoroso da teoria de homogeneização baseia-se na consideração de métodos como, por exemplo, o de Tartar [Tartar 78] ou da convergência a duas escalas [Nguetseng 89]. Porém, o estudo matematicamente rigoroso da metodologia de homogeneização de equações diferenciais parciais com coeficientes não-regulares não se enquadra no âmbito deste trabalho.

Capítulo 4

Método dos Elementos Finitos

4.1 Introdução

Neste capítulo expõem-se os princípios básicos da formulação do Método dos Elementos Finitos (MEF) aplicada à mecânica dos meios contínuos. Partindo da equação de equilíbrio elástico, expressa-se o Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV). Posteriormente, discretiza-se o problema e apresentam-se as componentes necessárias ao cálculo da matriz de rigidez e à construção do sistema de equações do problema. Expõem-se também os princípios básicos da definição isoparamétrica dos elementos finitos e dos métodos de integração numérica utilizados. Apresentam-se formas de controlar as condições de fronteira, especialmente as necessárias ao controlo de periodicidade para estratégias de homogeneização, e descrevem-se os procedimentos de cálculo das deformações e das tensões a partir da solução do problema.

4.2 Discretização Espacial do Problema

A formulação forte do problema diferencial que descreve o equilíbrio estático de um corpo sólido pode escrever-se como

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0. \quad (4.1)$$

A discretização espacial da equação anterior pode fazer-se quer recorrendo a um método variacional quer a um método de resíduos ponderados. Neste trabalho, recorre-se ao método dos resíduos ponderados de Galerkin. Para obter a formulação fraca do problema introduz-se o vector de deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ como função de ponderação. Esta função corresponde a um campo virtual de deslocamentos, nulo nas fronteiras com deslocamentos prescritos (Γ_u) (ver figura 4.1). Estabelece-se então que

$$\int_{\Omega} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\Omega + \int_{\Omega} \delta u_i b_i d\Omega = 0, \quad (4.2)$$

o que é equivalente à formulação descrita na relação diferencial 4.1. Integrando a primeira parcela por partes e recorrendo à relação

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}), \quad (4.3)$$

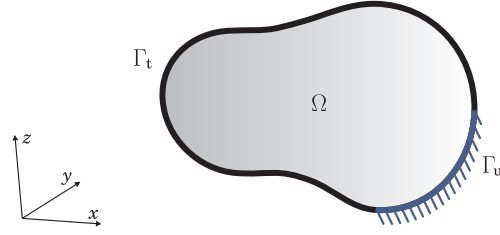


Figura 4.1: Representação bidimensional de um corpo sólido tridimensional genérico Ω .

obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\Omega = \int_{\Omega} (\delta u_i \sigma_{ij})_{,j} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\Omega. \quad (4.4)$$

Aplicando o teorema da divergência à primeira parcela do segundo membro da relação anterior chega-se a

$$\int_{\Omega} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\Omega = \int_{\Gamma_t} \delta u_i \sigma_{ij} n_j d\Gamma_t - \int_{\Omega} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\Omega. \quad (4.5)$$

Usando a relação $t_i = \sigma_{ij} n_j$ para definir as componentes de força de superfície por unidade de área, em que n_j é o versor normal exterior à superfície Γ_t , determina-se que

$$\int_{\Omega} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\Omega = \int_{\Gamma_t} \delta u_i t_i d\Gamma_t - \int_{\Omega} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\Omega. \quad (4.6)$$

A equação 4.2 completa-se introduzindo a relação 4.6 para obter

$$\int_{\Omega} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\Omega = \int_{\Gamma_t} \delta u_i t_i d\Gamma_t + \int_{\Omega} \delta u_i b_i d\Omega \quad (4.7)$$

Recorrendo à notação de Voight, a relação 4.7 pode escrever-se como

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u}^T \mathbf{t} d\Gamma_t + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}^T \mathbf{b} d\Omega. \quad (4.8)$$

A equação obtida corresponde à formulação fraca da equação diferencial de equilíbrio, que descreve o problema restringido pelas condições de fronteira necessárias [Zienkiewicz 89]. O primeiro termo desta relação, também conhecida como o Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV), é o trabalho interno (ou variação total de energia de deformação). As restantes parcelas correspondem ao trabalho realizado por forças de superfície e ao trabalho realizado por forças volúmicas.

É possível relacionar o campo dos deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ com o campo discretizado de deslocamentos virtuais, $\delta \mathbf{a}$, da seguinte forma:

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{N} \delta \mathbf{a}, \quad (4.9)$$

em que \mathbf{N} representa a matriz das funções de forma.

O campo de deslocamentos no interior de um elemento com n nós pode, segundo a relação 4.9, ser aproximado por

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum N_i u_i \\ \sum N_i v_i \\ \sum N_i w_i \end{Bmatrix} = \sum \mathbf{N}_i \mathbf{a}_i^e = \mathbf{N} \mathbf{a}^e, \quad (4.10)$$

em que

$$\mathbf{N} = [\mathbf{N}_1 \cdots \mathbf{N}_i \cdots \mathbf{N}_n], \quad \mathbf{N}_i = \begin{bmatrix} N_i & 0 & 0 \\ 0 & N_i & 0 \\ 0 & 0 & N_i \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

e

$$\mathbf{a}^e = \begin{Bmatrix} \mathbf{a}_1^e \\ \vdots \\ \mathbf{a}_i^e \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^e \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{a}_i^e = \begin{Bmatrix} u_i \\ v_i \\ w_i \end{Bmatrix}. \quad (4.12)$$

Aplicando as relações entre deformação e deslocamento e a expressão 4.9, o tensor das deformações para o elemento genérico de n nós é

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \mathbf{a}^e, \quad (4.13)$$

com

$$\mathbf{B} = [\mathbf{B}_1 \cdots \mathbf{B}_i \cdots \mathbf{B}_n] \quad \text{e} \quad \mathbf{B}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_i}{\partial z} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial z} & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix}. \quad (4.14)$$

4.3 Elementos Finitos Isoparamétricos

Neste trabalho utilizam-se elementos finitos tetraédricos e hexaédricos lineares e quadráticos. Os sistemas de eixos necessários à definição das funções de forma são os representados na figura 4.2. Os sistemas definidos para os elementos tetraédricos têm coordenadas que variam no intervalo $[0, 1]$, enquanto nos elementos hexaédricos variam em $[-1, 1]$. Estes correspondem aos sistemas de coordenadas naturais dos elementos, usados para a definição isoparamétrica.

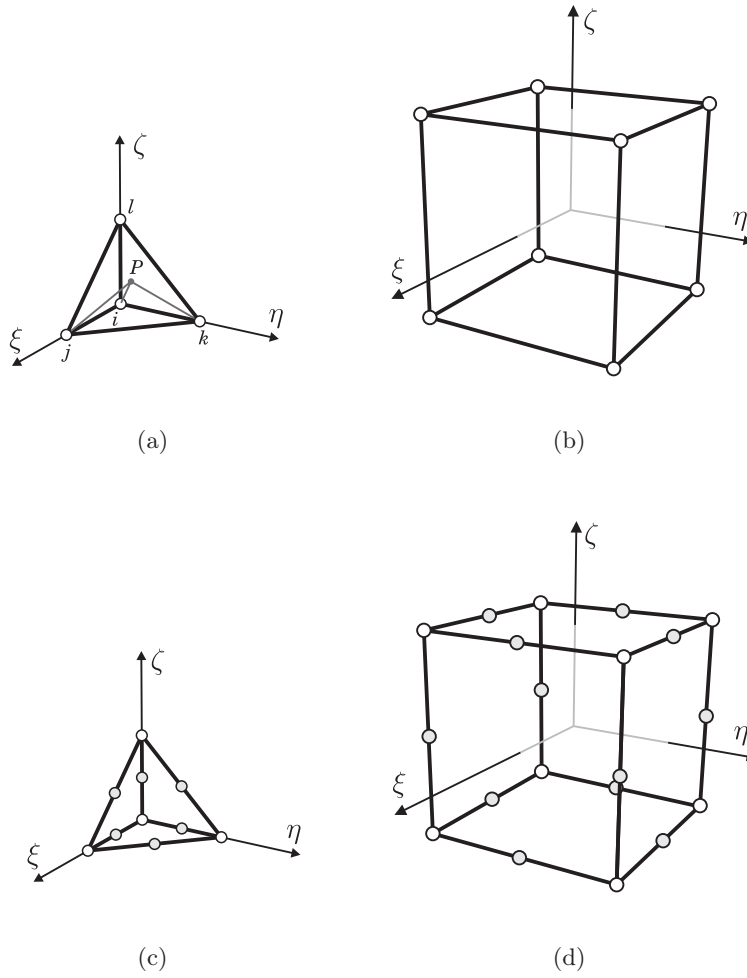


Figura 4.2: Elementos finitos utilizados: (a) tetraedro linear, (b) hexaedro linear, (c) tetraedro quadrático e (d) hexaedro quadrático.

Elementos Lineares

As funções de forma do elemento tetraédrico linear de 4 nós podem ser calculadas recorrendo às funções forma de volume

$$L_i = \frac{V_{Pjkl}}{V^e}, \quad (4.15)$$

em que $i \neq j, k, l$ e P é um ponto genérico no interior do elemento. V_{Pjkl} é o volume de um tetraedro com vértices P, j, k e l , como se mostra na figura 4.2(a). V^e é o volume do elemento finito tetraédrico. Relacionando as operações descritas, obtêm-se as funções de forma

$$\begin{aligned} L_i &= 1 - \xi - \eta - \zeta, \\ L_j &= \xi, \\ L_k &= \eta \quad \text{e} \\ L_l &= \zeta. \end{aligned} \quad (4.16)$$

As funções de forma do elemento hexaédrico de 8 nós podem calcular-se recorrendo aos polinómios de Lagrange, isto é,

$$\mathcal{L}_i^n(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad (4.17)$$

em que i designa um nó genérico e n é o grau do polinómio. A aplicação dos polinómios de Lagrange ao cálculo das funções de forma de elementos trilineares de 8 nós resulta em

$$N_i = \mathcal{L}_i^1(\xi) \mathcal{L}_i^1(\eta) \mathcal{L}_i^1(\zeta) \quad (4.18)$$

ou, depois de substituídas as funções, em

$$N_i = \frac{1}{8}(1 + \xi_0)(1 + \eta_0)(1 + \zeta_0), \quad (4.19)$$

em que se considera a substituição de variáveis

$$\xi_0 = \xi \xi_i, \quad \eta_0 = \eta \eta_i \quad \text{e} \quad \zeta_0 = \zeta \zeta_i. \quad (4.20)$$

$\{\xi_i \ \eta_i \ \zeta_i\}^T$ é o vector de posição genérica do nó i .

Elementos Quadráticos

No caso do elemento tetraédrico de 10 nós, as funções de forma podem ser determinadas recorrendo às mesmas funções (L_i) definidas para o elemento tetraédrico linear. Deste modo, obtêm-se as funções genéricas

$$N_i = (2L_i - 1)L_i, \quad (4.21)$$

para os nós dos vértices do elemento, e

$$N_i = 4L_j L_k, \quad (4.22)$$

para os nós i das arestas com extremidades nos nós j e k .

As funções de forma do elemento hexaédrico de 20 nós podem calcular-se recorrendo aos polinómios de Lagrange de segundo grau. Substituindo as variáveis expressas nas relações 4.20, as funções de forma dos nós dos vértices do elemento são

$$N_i = \frac{1}{8}(1 + \xi_0)(1 + \eta_0)(1 + \zeta_0)(\xi_0 + \eta_0 + \zeta_0 - 2). \quad (4.23)$$

Para os nós intermédios, com uma das coordenadas nula, as funções de forma podem ser obtidas a partir das expressões

$$N_i = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(1 + \eta_0)(1 + \zeta_0), \quad \text{para } \xi_i = 0, \eta_i = \pm 1, \zeta_i = \pm 1, \quad (4.24)$$

$$N_i = \frac{1}{4}(1 - \eta^2)(1 + \xi_0)(1 + \zeta_0), \quad \text{para } \eta_i = 0, \xi_i = \pm 1, \zeta_i = \pm 1 \quad \text{e} \quad (4.25)$$

$$N_i = \frac{1}{4}(1 - \zeta^2)(1 + \xi_0)(1 + \eta_0), \quad \text{para } \zeta_i = 0, \xi_i = \pm 1, \eta_i = \pm 1. \quad (4.26)$$

Definição Isoparamétrica dos Elementos

A formulação isoparamétrica facilita a utilização de elementos de geometria irregulares (ver figura 4.3). O termo isoparamétrico advém do facto de se usarem as mesmas funções de forma para interpolar quer a geometria quer os deslocamentos [Oñate 95]. A definição do elemento efectua-se a partir das coordenadas nodais no referencial $Oxyz$. Contudo, através da transformação isoparamétrica, a integração elementar é realizada no referencial natural $O\xi\eta\zeta$, para a geometria normalizada do elemento.

As coordenadas de um qualquer ponto de um elemento isoparamétrico de n nós definem-se como

$$\mathbf{x} = \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} = \sum \mathbf{N}_i \mathbf{x}_i^e = \mathbf{N} \mathbf{x}^e, \quad (4.27)$$

em que as componentes $N_i = f(\xi, \eta, \zeta)$ das matrizes \mathbf{N}_i são as funções de forma definidas em 4.11. Se o determinante da matriz Jacobiana da transformação $(x, y, z) \rightarrow (\xi, \eta, \zeta)$ for positivo para todos os pontos do elemento, esta relação é biunívoca [Oñate 95].

Sendo os deslocamentos do elemento determinados nas suas coordenadas cartesianas, as deformações do elemento são obtidas para esse referencial. Para o cálculo das relações entre deformação e deslocamento e a definição da rigidez elementar a partir do sistema de coordenadas naturais do elemento é necessário calcular a matriz Jacobiana da transformação de coordenadas, \mathbf{J}^e [Zienkiewicz 89]. Recorrendo à regra de derivação em cadeia chega-se à relação

$$\mathbf{J}^e \frac{\partial \mathbf{N}_i}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix}. \quad (4.28)$$

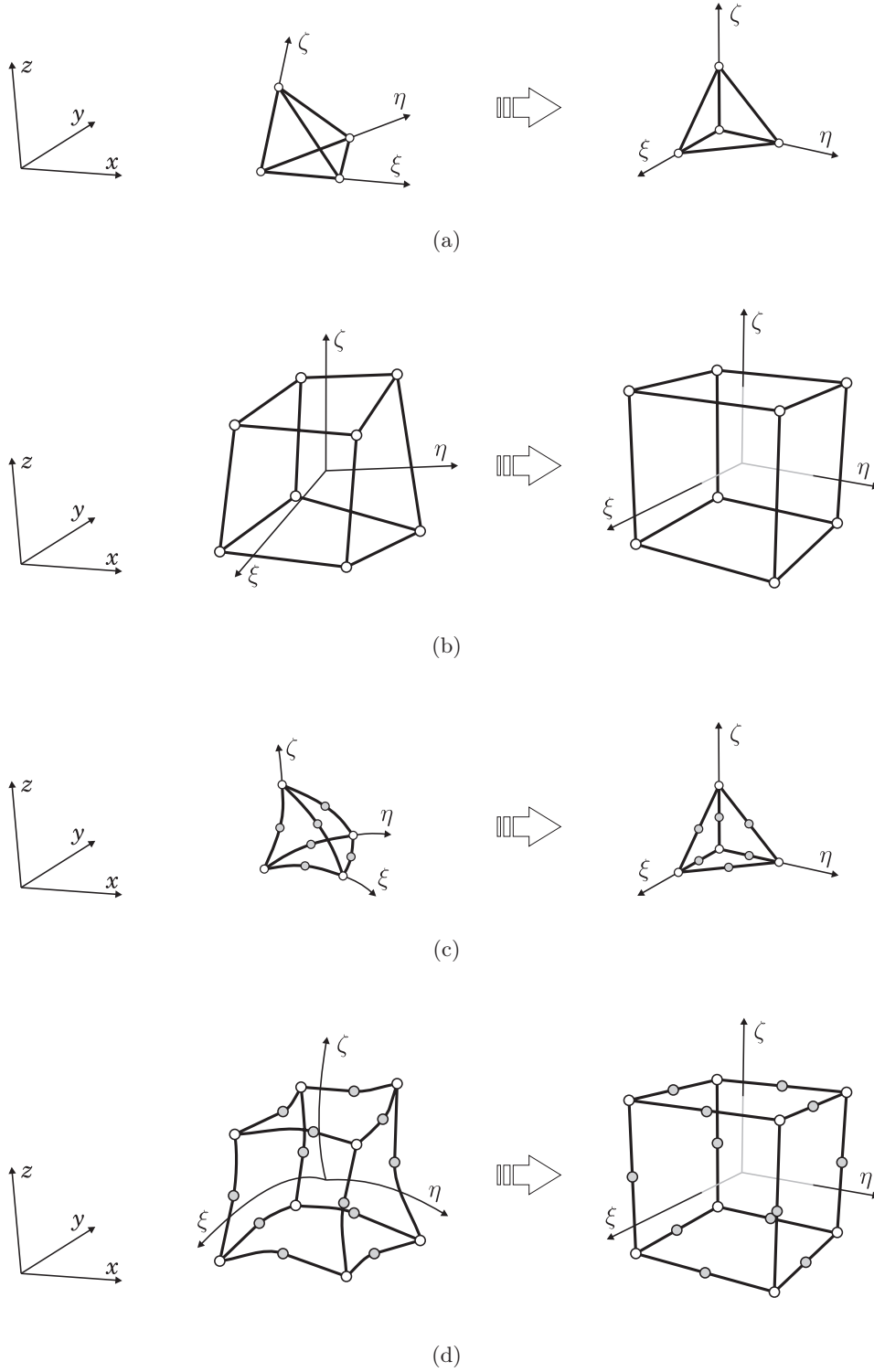


Figura 4.3: Referenciais global e natural dos elementos isoparamétricos utilizados: (a) elemento tetraédrico de 4 nós, (b) elemento hexaédrico de 8 nós, (c) elemento tetraédrico de 10 nós e (d) elemento hexaédrico de 20 nós.

Invertendo a matriz \mathbf{J}^e , resulta

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = [\mathbf{J}^e]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix}. \quad (4.29)$$

Com a expressão anterior calculam-se as derivadas parciais no referencial cartesiano a partir da definição isoparamétrica do elemento. Por outro lado, para a definição da matriz de rigidez elementar é ainda necessário expressar o diferencial de volume dV em função da definição isoparamétrica, isto é [Oñate 95],

$$dxdydz = |\mathbf{J}^e| d\xi d\eta d\zeta. \quad (4.30)$$

4.4 Formulação de Elementos Finitos

No método dos elementos finitos, o corpo sólido é discretizado em elementos, interligados nos seus limites por nós, onde é calculada a solução do problema. Nos parágrafos seguintes, calculam-se as matrizes de rigidez elementares e constroem-se os sistemas de equações de equilíbrio. Se $\delta \mathbf{a}^e$ for o vector dos deslocamentos nodais virtuais do elemento e \mathbf{f}^e o vector das forças nodais, o Princípio dos Trabalhos Virtuais pode escrever-se como (ver equações 4.8)

$$(\delta \mathbf{a}^e)^T \mathbf{f}^e = \int_{V^e} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (4.31)$$

O vector de forças nodais, \mathbf{f}^e , é definido por [Oñate 95]

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^e = & \int_{V^e} \mathbf{N}^T \mathbf{b} dV + \int_{A^e} \mathbf{N}^T \mathbf{t} dA + \int_{V^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^0 dV \\ & - \int_{V^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^0 dV + \sum \mathbf{q}_i. \end{aligned} \quad (4.32)$$

A primeira parcela do segundo membro é vector das forças volúmicas e a segunda representa as forças de superfície. A terceira e quarta parcelas correspondem às deformações e tensões iniciais, respectivamente. A última parcela diz respeito aos carregamentos pontuais.

O campo de deformações é $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \mathbf{a}^e$ e o campo de tensões $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a}^e$. \mathbf{D} é a matriz de elasticidade do material e \mathbf{B} é a matriz das derivadas das funções de forma. O segundo membro da equação 4.31 pode reescrever-se como

$$\int_{V^e} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} dV = \int_{V^e} (\delta \mathbf{a}^e)^T \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a}^e dV. \quad (4.33)$$

Uma vez que os deslocamentos nodais são independentes da posição no elemento, a relação 4.31 pode reescrever-se da seguinte forma:

$$(\delta \mathbf{a}^e)^T \mathbf{f}^e = (\delta \mathbf{a}^e)^T \int_{V^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV \mathbf{a}^e, \quad (4.34)$$

ou ainda

$$\mathbf{f}^e = \int_{V^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV \delta \mathbf{a}^e. \quad (4.35)$$

Esta relação corresponde a $\mathbf{f}^e = \mathbf{K}^e \mathbf{a}^e$ e estabelece o equilíbrio elástico para cada elemento finito. Assim, chega-se à seguinte definição de matriz de rigidez elementar \mathbf{K}^e :

$$\mathbf{K}^e = \int_{V^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV. \quad (4.36)$$

Recorrendo à definição isoparamétrica dos elementos, a matriz de rigidez elementar é composta pelas submatrizes

$$\mathbf{K}_{ij}^e = \int_{V^e} \mathbf{B}_i^T(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{D} \mathbf{B}_j(\xi, \eta, \zeta) |\mathbf{J}^e| d\xi d\eta d\zeta, \quad (4.37)$$

que relacionam os nós i e j do elemento e [Oñate 95].

4.5 Integração Numérica

Para os elementos isoparamétricos definidos nas secções anteriores, os integrais têm a forma genérica

$$\int_{V^e} \mathbf{F}(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta, \quad (4.38)$$

em que \mathbf{F} representa uma função genérica a integrar no volume do elemento, V^e . Na prática, estes integrais são determinados numericamente por [Bathe 96]

$$\int_{V^e} \mathbf{F}(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta = \sum_{i=1}^{n_i} \sum_{j=1}^{n_j} \sum_{k=1}^{n_k} w_i w_j w_k \mathbf{F}(\xi_i, \eta_j, \zeta_k), \quad (4.39)$$

em que w_i , w_j e w_k são os pesos de integração, $\mathbf{F}(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)$ é a matriz \mathbf{F} calculada em cada ponto com coordenadas resultantes da combinação de ξ_i , η_j e ζ_k . n_i , n_j e n_k são os números de pontos de integração em cada uma das direcções naturais. As coordenadas dos pontos de integração (ou pontos de Gauss), assim como os pesos w_i , w_j e w_k , resultam de regras de integração obtidas pela quadratura de Gauss-Legendre [Oñate 95].

4.6 Integração Reduzida Selectiva

A integração completa de elementos isoparamétricos trilineares de 24 graus de liberdade acarreta, muitas vezes, problemas de rigidificação excessiva (*locking*) [Olovsson 06]. Existem vários métodos para minimizar este efeito. Um desses métodos, implementado neste trabalho para os elementos hexaédricos lineares de 8 pontos de integração, é a integração reduzida selectiva, normalmente designada por método $\bar{\mathbf{B}}$.

O tensor de deformação pode ser decomposto nas suas componentes desviadora, $\varepsilon_{ij}^{\text{dev}}$, e hidrostática ou de dilatação, $\varepsilon_{ij}^{\text{dil}}$, como

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{\text{dev}} + \varepsilon_{ij}^{\text{dil}}, \quad (4.40)$$

em que

$$\varepsilon_{ij}^{\text{dil}} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \quad \text{e} \quad \varepsilon_{ij}^{\text{dev}} = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{\text{dil}}. \quad (4.41)$$

Neste sentido, em termos de implementação, a matriz \mathbf{B}_i (ver equação 4.14) pode decompor-se nas suas partes desviadora, $\mathbf{B}_i^{\text{dev}}$, e hidrostática, $\mathbf{B}_i^{\text{dil}}$, em que

$$\mathbf{B}_i = \begin{bmatrix} B_1 & 0 & 0 \\ 0 & B_2 & 0 \\ 0 & 0 & B_3 \\ B_2 & B_1 & 0 \\ 0 & B_3 & B_2 \\ B_3 & 0 & B_1 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

e

$$\mathbf{B}_i^{\text{dil}} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.43)$$

sendo

$$\mathbf{B}_i^{\text{dev}} = \mathbf{B}_i - \mathbf{B}_i^{\text{dil}}. \quad (4.44)$$

No método $\bar{\mathbf{B}}$, a componente hidrostática é substituída por uma matriz modificada $\bar{\mathbf{B}}^{\text{dil}}$. Além disso, a matriz \mathbf{B} é substituída pela matriz $\bar{\mathbf{B}}$, definida como

$$\bar{\mathbf{B}}_i = \mathbf{B}_i^{\text{dev}} + \bar{\mathbf{B}}_i^{\text{dil}}, \quad (4.45)$$

em que

$$\bar{\mathbf{B}}_i^{\text{dil}} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ \bar{B}_1 & \bar{B}_2 & \bar{B}_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.46)$$

O procedimento $\bar{\mathbf{B}}$ reduz-se à definição apropriada dos termos \bar{B}_i [Hughes 87]. Existem várias propostas [Nagteegal 74, Nakamura 86, Hughes 87, Olovsson 06] para a definição de $\bar{\mathbf{B}}$, a mais simples das quais consiste no cálculo das derivadas parciais apenas no ponto central do elemento. Outro método, adoptado neste trabalho por conduzir normalmente a melhores resultados, é o da formulação da dilatação média [Nagteegal 74, Hughes 87]. Neste caso, calcula-se a média volúmica $\bar{\mathbf{B}}$, isto é,

$$\bar{\mathbf{B}} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \mathbf{B}_i dV^e. \quad (4.47)$$

$\bar{\mathbf{B}}_i^{\text{dil}}$ (ver equação 4.46) passa a ser constituída pela componente hidrostática de $\tilde{\mathbf{B}}_i$. O volume do elemento pode ser calculado através do determinante da matriz Jacobiana como

$$V^e = \sum_{i=1}^8 \det(\mathbf{J}_i). \quad (4.48)$$

Assim, só é necessário calcular os seguintes três termos de $\bar{\mathbf{B}}_i$:

$$\bar{B}_1 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial x} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial x} dV^e, \quad (4.49)$$

$$\bar{B}_2 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial y} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial y} dV^e \quad e \quad (4.50)$$

$$\bar{B}_3 = \frac{\partial \bar{N}}{\partial z} = \frac{1}{V^e} \int_{V^e} \frac{\partial N}{\partial z} dV^e. \quad (4.51)$$

Em termos práticos, esta formulação força a que a deformação hidrostática seja idêntica em cada ponto de Gauss.

Em problemas de elasticidade, um deslocamento nodal que resulte em deformação, apesar de não corresponder a um movimento de corpo rígido, designa-se por modo singular espúrio ou modo de energia nulo [Bathe 96]. Para elementos hexaédricos, estes modos de deformação assemelham-se a ampulhetas, de onde deriva a designação comum de modos *hourglass*. O método $\bar{\mathbf{B}}$, pelo facto de impor uma pressão constante no elemento, pode induzir modos de energia nulos. Este comportamento pode evitar-se recorrendo, por exemplo, ao procedimento sugerido por Nakamura *et al.* [Nakamura 86]. Para tal, calcula-se uma nova matriz $\bar{\mathbf{B}}^*$ do seguinte modo:

$$\bar{\mathbf{B}}_i^* = \mathbf{B}_i^{\text{dev}} + \bar{\mathbf{B}}_i^{\text{dil}} + \epsilon [\mathbf{B}_i^{\text{dil}} - \bar{\mathbf{B}}_i^{\text{dil}}]. \quad (4.52)$$

No caso de o factor de ponderação ϵ ser 0, o método degenera na formulação $\bar{\mathbf{B}}$. Se $\epsilon = 1$ obtém-se a matriz \mathbf{B} convencional.

4.7 Problema Global

4.7.1 Sistema de Equações

A construção do sistema global de equações realiza-se assemblando as matrizes de rigidez elementares para formar a matriz de rigidez global. Uma forma de o fazer consiste em somar as contribuições elementares no sistema global de equações, garantindo a coerência dos graus de liberdade. Esta forma de assemblagem corresponde ao método directo de obtenção da rigidez global [Oñate 95] e pode expressar-se como

$$\mathbf{K}^g = \sum_i^{n_e} \mathbf{K}_i^e, \quad (4.53)$$

em que o somatório deve ser entendido como o processo usual de assemblagem. n_e é o número de elementos, \mathbf{K}^g é a matriz de rigidez global e \mathbf{K}_i^e são as matrizes de rigidez elementares. O sistema global de equações resultante tem a forma

$$\mathbf{K}^g \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (4.54)$$

em que \mathbf{u} é o vector dos deslocamentos e \mathbf{f} o vector das forças exteriores.

4.7.2 Condições de Fronteira

Nesta secção descrevem-se as condições de fronteira de deslocamento. Centra-se esta descrição na imposição de condições de fronteira genéricas de relação entre graus de liberdade (*Multi-Freedom Constraints* (MFC) [Felippa 04]), importantes, por exemplo, para garantir a periodicidade das células representativas unitárias.

Distinguem-se as condições de fronteira aqui descritas, designadas essenciais por afectarem directamente os graus de liberdade, das condições indirectas ou naturais, como a imposição de carregamentos. Os métodos apresentados para imposição de condições de fronteira MFC são também válidos para a prescrição de deslocamentos.

4.7.2.1 Método de Penalidade

No que diz respeito à imposição de condições MFC, o método de penalidade é o mais comum, por ser de implementação simples. Do ponto de vista numérico, a imposição de uma condição de periodicidade ($u_i - u_j = 0$) corresponde a acrescentar um elemento barra com uma rigidez correspondente ao peso de penalidade w_p , de ligação entre os dois graus de liberdade a controlar (ver figura 4.4(a)). A imposição da relação $u_i = u_j$ consiste em assemblar

$$w_p \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (4.55)$$

no sistema global de equações $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$. O sistema de equações lineares resultante tem a forma

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & & \vdots & \\ \dots & w_p + K_{ii} & \dots & -w_p + K_{ij} & \dots \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \dots & -w_p + K_{ji} & \dots & w_p + K_{jj} & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \end{Bmatrix}. \quad (4.56)$$

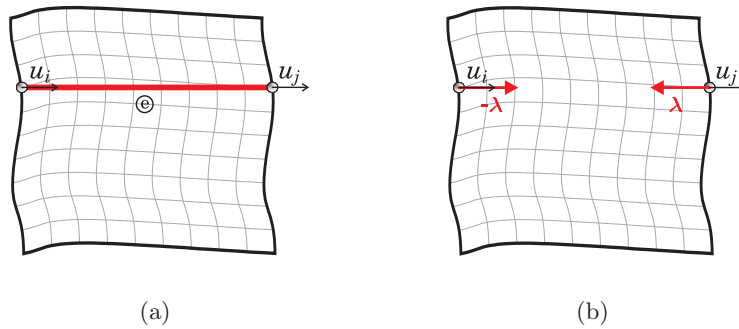


Figura 4.4: Aplicação de condições de fronteira *Multi-Freedom Constraints* (MFC) com o método (a) da penalidade e (b) dos multiplicadores de Lagrange.

Na utilização deste método, é importante escolher correctamente o peso de penalidade w_p . Este valor escalar aumenta o peso da condição $u_i = u_j$ no sistema de equações pelo que, idealmente, deveria ser $w_p = +\infty$. Consequentemente, para w_p finito existe sempre um erro associado que, no caso exposto, é $e_g = u_i - u_j \neq 0$. A magnitude $|e_g|$ tende a ser inversamente proporcional a w_p . No entanto, existem limitações à escolha do valor do peso de penalidade, quer a nível de *hardware* quer de *software*. Por um lado, o valor de w_p é limitado pelo valor de *overflow*¹ do computador utilizado. Por outro lado, surgem questões numéricas relacionadas com a inversão da matriz de rigidez, para valores de w_p muito inferiores aos de *overflow*. De facto, o aumento do peso de penalidade torna a matriz de rigidez mal-condicionada. No limite, as linhas e colunas que contêm a condição tornam-se linearmente dependentes, levando a que a matriz de rigidez se torne singular. Porém, w_p deve ser várias ordens de grandeza superior à norma máxima² da matriz de rigidez. Para otimizar o valor utilizado, é comum seguir um método heurístico designado por regra da raiz quadrada. Para uma matriz cujo maior coeficiente seja 10^k , com precisão de p dígitos, o peso de penalidade deverá ser $10^{k+p/2}$ [Felippa 04].

A forma apresentada é apenas válida para condições simples e homogêneas, em que o segundo membro da condição é nulo (e.g. $\alpha u_i + u_j = 0$). A teoria geral do método está associada à teoria variacional das funções de penalidade de Courant [Felippa 04] e excede o âmbito deste trabalho. No entanto, apresenta-se uma forma mais geral de obter o sistema de equações correspondente a uma condição de fronteira genérica. Assim, considere-se uma condição não-homogênea do tipo $\alpha u_i + \beta u_j + \kappa u_k = \theta$. Se $\mathbf{c} = \{ \alpha \ \beta \ \kappa \}$ e $\mathbf{u} = \{ u_i \ u_j \ u_k \}^T$, a condição geral pode escrever-se na forma

$$w_p \mathbf{c}^T \mathbf{c} \mathbf{u} = w_p \theta \mathbf{c}^T, \quad (4.57)$$

válida para condições de fronteira MFC generalizadas.

4.7.2.2 Método dos Multiplicadores de Lagrange

Fazendo o paralelo físico com os métodos de penalidade, a aplicação dos multiplicadores de Lagrange corresponde à adição dos carregamentos necessários para forçar o equilíbrio pretendido, em vez de se manipular a rigidez aparente do sistema. Considerando uma condição homogênea do tipo $u_i = u_j$, tal consiste na imposição de uma força de intensidade λ a cada um dos graus de liberdade (ver figura 4.4(b)). λ é o multiplicador de Lagrange e surge no vector de forças do sistema. Porém, sendo mais uma incógnita, é transferido para o vector das incógnitas, obrigando à expansão do sistema de equações. Assim, a imposição

¹ *Overflow* designa situações em que cálculos computacionais produzem blocos de dados ou valores numéricos demasiado elevados para serem alocados na unidade de memória.

² A norma máxima de uma matriz \mathbf{A} é $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max |a_{ij}|$.

da condição $u_i - u_j = 0$ consiste em transformar o sistema $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ em

$$\begin{bmatrix} & & & & & 0 \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & \\ & & & & 0 & \\ \dots & K_{ii} & \dots & K_{ij} & \dots & 1 \\ & & & & & 0 \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \dots & K_{ji} & \dots & K_{jj} & \dots & -1 \\ & & & & & 0 \\ & & \vdots & & \vdots & \\ 0 \dots 0 & 1 & 0 \dots 0 & -1 & 0 \dots 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

A aplicação de multiplicadores de Lagrange pode generalizar-se da forma

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{b} \end{Bmatrix} \quad (4.59)$$

para impor um conjunto de condições lineares quaisquer, definidas pelo sistema $\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{b}$, em que $\boldsymbol{\lambda}$ é um vector de componentes λ_i . Para além dos deslocamentos, determinam-se também os valores λ_i necessários ao equilíbrio. Estes valores podem utilizar-se no cálculo das reacções correspondentes aos graus de liberdade condicionados, como $-\mathbf{A}^T\boldsymbol{\lambda}$.

A maior vantagem deste método relativamente aos métodos de penalidade é o facto de ser um método exacto. Adicionalmente, facilita o cálculo das reacções nos graus de liberdade com condições de fronteira e não necessita do controlo de parâmetros de penalidade. Por outro lado, introduz incógnitas adicionais e obriga à utilização de algoritmos de armazenamento mais complexos para responder à necessidade de redimensionamento do sistema. Além disso, é fortemente sensível à dependência linear das equações que definem as condições e não se adapta a algoritmos de resolução baseados em matrizes definidas positivas³ como, por exemplo o método do gradiente conjugado. Na tabela 4.1 mostra-se um resumo comparativo das características dos dois métodos descritos nos parágrafos anteriores.

³Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diz-se definida positiva se $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$.

Tabela 4.1: Comparação dos métodos de imposição de condições de fronteira *Multi-Freedom Constraints* (MFC) [Felippa 04].

Característica	Penalidade	Mult. Lagrange
Aplicabilidade a condições genéricas	Excelente	Excelente
Facilidade de implementação	Boa	Razoável
Precisão	Medíocre	Excelente
Sensibilidade à dependência linear de equações	Nenhuma	Elevada
Mantém matriz definida positiva?	Sim	Não
Modifica o vector das incógnitas?	Não	Sim

Capítulo 5

Implementação

5.1 Introdução

Neste capítulo exploram-se as características essenciais das ferramentas de cálculo numérico desenvolvidas. Começa-se por focar o programa-base, 3DFRAN, de cálculo estrutural tridimensional linear elástico com recurso ao Método dos Elementos Finitos (MEF). Abordam-se as várias ferramentas e procedimentos que ao longo do trabalho completam o programa. As interfaces de pré- e pós-processamento associadas ao programa baseiam-se no programa GiD[®]¹. Focam-se também as ferramentas SPHERECELL e SLAVERY desenvolvidas para gerar células representativas unitárias e atribuir condições de fronteira de periodicidade, respectivamente. Referem-se ainda questões relacionadas com a resolução do sistema de equações e com o esquema de armazenamento adoptado. Abordam-se questões de implementação de algoritmos de homogeneização e descrevem-se alguns aspectos relacionados com a paralelização do programa.

5.2 O Programa 3DFRAN

O programa 3DFRAN é um programa de simulação numérica baseado no método dos elementos finitos. A linguagem de programação utilizada foi o Fortran 90. Nas secções que se seguem, exploram-se os seus procedimentos mais importantes. Começa-se por focar questões relacionadas com o pré-processamento. De seguida, aborda-se o procedimento de integração elementar e o formato de assemblagem e de armazenamento da matriz de rigidez global. Descrevem-se também os princípios genéricos do método de resolução do sistema de equações lineares utilizado neste trabalho. Por fim, resumem-se as particularidades de implementação do cálculo multiescala e homogeneização por expansão assintótica no programa 3DFRAN.

5.2.1 Pré-Processamento

As tarefas de pré-processamento são realizadas com o programa GiD[®]. Este programa é uma interface gráfica de modelação geométrica, com várias características que o tornam útil

¹O programa GiD[®] é um pré- e pós-processador desenvolvido pelo CIMNE – *International Center for Numerical Methods in Engineering* (<http://www.cimne.upc.es/>).

no pré-processamento de problemas de simulação numérica. Para além de procedimentos de geração de malha com diversos tipos de elementos, de controlo de malha (estruturada ou não) e de vários protocolos de importação de geometrias externas, fornece ao utilizador amplas possibilidades configuração. Para utilizar o programa GiD[®] como pré-processador é necessário predefinir toda a informação pedida ao utilizador, assim como a forma como os dados são fornecidos ao programa de simulação. As definições são distribuídas por ficheiros de configuração do programa GiD[®], descrevendo as condições de fronteira, os materiais, os dados gerais de definição do problema e o formato do ficheiro de entrada do programa de simulação. Ao conjunto das configurações de personalização dá-se o nome de problema-tipo do GiD[®]. Com as alterações efectuadas, o processador gráfico funciona como interface gráfica para o programa 3DFRAN. Para além da criação das geometrias, pode gerar-se malhas de elementos finitos, impor condições de fronteira, atribuir propriedades de materiais e especificar outros parâmetros de cálculo. O GiD[®] gera ficheiros de dados com formatos previamente estabelecidos que são lidos directamente pelo programa de cálculo.

5.2.2 Integração Elementar

A discretização espacial definida pelo método dos elementos finitos permite que o sistema de equações seja construído conjugando as contribuições de todos os elementos. O algoritmo de cálculo das contribuições elementares (ver equação 4.37) é resumido na tabela 5.1 [Smith 82].

Tabela 5.1: Algoritmo de cálculo da rigidez elementar.

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none">1. Identificar coordenadas e conectividade2. Iniciar matriz de rigidez elementar3. Definir coordenadas e pesos de integração dos pontos de Gauss4. REPETIR para cada ponto de Gauss<ol style="list-style-type: none">4.1 Calcular derivadas parciais das funções de forma4.2 Calcular \mathbf{J} (equação 4.28)4.3 Converter derivadas parciais para o referencial global, com \mathbf{J}^{-1}4.4 Construir \mathbf{B}4.5 Calcular $\mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} w_i$4.6 Adicionar à matriz de rigidez elementar5. Assemblar na matriz rigidez global |
|--|

5.2.3 Formato de Armazenamento

Nas análises por elementos finitos consideradas neste trabalho as matrizes de coeficientes são frequentemente esparsas. De facto, na generalidade dos problemas, os coeficientes não-nulos constituem uma percentagem reduzida do número total de coeficientes. Por conseguinte, a utilização da totalidade da matriz reduz a eficiência das operações matriciais.

Esta redução na eficiência torna-se ainda mais evidente com o aumento da dimensão do problema, uma vez que o número de coeficientes nulos tende a aumentar. Este facto leva a que o esforço computacional seja desperdiçado em multiplicações com coeficientes nulos. Esta limitação pode ser ultrapassada identificando os coeficientes nulos e eliminando as correspondentes operações de multiplicação.

Face ao exposto, a escolha do algoritmo de armazenamento recaiu sobre o esquema *Compressed Row Storage* (CRS). As vantagens deste formato são significativas [Barret 94], permitindo o armazenamento de $2n_{\bar{n}} + n + 1$ coeficientes, em oposição aos n^2 coeficientes do esquema de armazenamento total. $n \times n$ é a dimensão da matriz e $n_{\bar{n}}$ o número de coeficientes não-nulos. Para ilustrar a aplicação do esquema de armazenamento CRS considere-se, como exemplo, a seguinte matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & b \\ c & d & 0 & 0 \\ 0 & e & f & g \\ h & 0 & i & j \end{bmatrix}.$$

O armazenamento CRS de \mathbf{A} é especificado através dos seguintes três vectores:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \{ a \ b \ c \ d \ e \ f \ g \ h \ i \ j \}; \\ \mathbf{i} &= \{ 1 \ 4 \ 1 \ 2 \ 2 \ 3 \ 4 \ 1 \ 3 \ 4 \}; \\ \mathbf{j} &= \{ 1 \ 3 \ 5 \ 8 \ 11 \}. \end{aligned}$$

O método armazena a matriz \mathbf{A} num vector que contém unicamente os valores não-nulos (\mathbf{m}). Os vectores \mathbf{i} e \mathbf{j} correspondem ao número da coluna de cada coeficiente não-nulo na matriz \mathbf{A} e ao índice do primeiro valor de cada linha em \mathbf{m} , respectivamente. A última componente do vector \mathbf{j} é usada no formato CRS para especificar a dimensão $n_{\bar{n}}$ do vector \mathbf{m} , tendo o valor $n_{\bar{n}} + 1$.

No esquema CRS é a própria conectividade que determina os índices dos vectores de ponteiros. Desta forma evitam-se os cuidados específicos com a ordenação dos graus de liberdade do sistema. Em rigor, a assemblagem é feita de forma natural. Os índices globais são ditados pela relação entre a conectividade de cada elemento e a numeração dos graus de liberdade. Refira-se ainda que é possível alterar o esquema para, no caso de matrizes simétricas, armazenar apenas a parte triangular superior (ou inferior), minimizando a memória necessária para o armazenamento. No entanto, esta alteração obriga à utilização de algoritmos mais complexos quer para o acesso aos dados quer para a realização de operações matriciais [Barret 94]. No tipo de problemas resolvidos neste trabalho, a redução de memória não justifica o aumento da complexidade dos algoritmos associados, pelo que se opta por sacrificar a memória em prol da velocidade de processamento. Informação adicional sobre este tipo de metodologias pode ser encontrada em [Saad 03, Stathis 04].

5.2.4 Resolução do Sistema de Equações

A generalidade das análises de problemas pelo método dos elementos finitos resulta em sistemas de equações lineares do tipo

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \tag{5.1}$$

em que a matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é não-singular e geralmente esparsa. \mathbf{x} e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ são os vectores de incógnitas e de termos independentes, respectivamente.

Em simulações numéricas pelo método dos elementos finitos, a maior fracção do tempo de cálculo corresponde à resolução do sistema de equações 5.1 [van der Vorst 03], razão pela qual a selecção de um método numérico de resolução eficiente é muito importante. Os métodos de resolução dividem-se em (i) métodos directos e (ii) métodos iterativos [Meurant 99].

Os métodos directos baseiam-se na factorização da matriz \mathbf{A} . O método de eliminação de Gauss, ou de factorização \mathbf{LU} , é um exemplo de método directo. A robustez e a precisão na resolução de sistemas de equações lineares levam a que este tipo de método seja bastante utilizado. No entanto, a aplicação destes métodos a matrizes esparsas tem a desvantagem de requerer elevadas quantidades de memória computacional. Isto resulta da alteração do padrão de esparsidade da matriz de coeficientes do sistema. De facto, na aplicação do método de eliminação de Gauss verifica-se que posições originalmente nulas da matriz \mathbf{A} passam a ser ocupadas por valores não-nulos. Este fenómeno, habitualmente designado por *fill-in*, resulta na transformação de uma matriz originalmente esparsa numa matriz densa. Os métodos directos apresentam ainda um baixo grau de paralelismo, o que limita a expansibilidade para sistemas de computação paralela. Além disso, a propagação de erros numéricos nas operações aritméticas pode originar problemas de precisão numérica. Mais detalhes sobre métodos directos para a resolução de sistemas com matrizes esparsas podem ser consultados em [Duff 89].

Nos métodos iterativos define-se uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ para a solução \mathbf{x}^* . Com base num processo iterativo, gera-se uma sucessão de vectores-solução $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}\}$ até que a solução numérica seja suficientemente próxima da solução exacta. De uma forma geral, um método iterativo diz-se convergente se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*. \quad (5.2)$$

Neste contexto, um processo iterativo corresponde a uma técnica em que, dada uma aproximação inicial da solução, se procura minimizar o erro $\mathbf{e} = \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)}$ ou o resíduo $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(k)}$. De um modo geral, as principais vantagens dos métodos iterativos relativamente aos métodos directos são [Axelsson 96, Saad 03]:

1. O desempenho computacional do processo pode ser melhorado se a aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ for próxima de \mathbf{x}^* ;
2. Não alteram o padrão da esparsidade da matriz de coeficientes do sistema, exigindo menores quantidades de memória computacional;
3. Não exigem a definição explícita da matriz de coeficientes do sistema, pelo que se revelam adequados para paralelização.

Refira-se, no entanto, que geralmente não é possível prever o número de iterações necessárias para atingir uma determinada precisão. Assim, embora ambos os tipos de método apresentem vantagens e desvantagens, é usualmente a natureza do problema que determina qual o método de resolução mais adequado.

Os métodos iterativos são geralmente classificados em (i) métodos estacionários e (ii) métodos não-estacionários. Os métodos não-estacionários distinguem-se dos estacionários no sentido em que os dados são alterados no decorrer de cada iteração. Embora apresentem

um nível de complexidade superior, os métodos não-estacionários são frequentemente mais eficientes [Saad 03]. Actualmente, os métodos iterativos não-estacionários mais populares pertencem ao conjunto de métodos baseados em subespaços de Krylov [van der Vorst 03]. A sua utilização é determinada pelas características da matriz de coeficientes \mathbf{A} . Consequentemente, uma vez que o tipo de problemas resolvidos neste trabalho envolve sistemas com matrizes simétricas e definidas positivas, o método do Gradiente Conjugado (GC) [Hestenes 52] é o mais indicado.

5.2.4.1 Método do Gradiente Conjugado

O método do gradiente conjugado é actualmente considerado uma das técnicas mais eficientes para a resolução de sistemas de equações lineares com matrizes de coeficientes simétricas e definidas positivas [Golub 89]. Inicialmente considerado um método directo por permitir obter a solução de um sistema de n equações lineares num máximo de n iterações, rapidamente se constatou que os erros provenientes do arredondamento numérico destruíam a propriedade de convergência finita deste método, não constituindo uma alternativa eficiente para a factorização de sistemas de equações lineares densos. No entanto, o método do GC é hoje considerado um método iterativo [Reid 71]. Apesar de ser muitas vezes incapaz de superar a velocidade de cálculo de alguns métodos directos [Irons 80], o método do GC é uma alternativa competitiva [Farhat 87]. Uma das razões para tal é a utilização de preconditionadores. Verifica-se que a velocidade de convergência do método do GC depende do condicionamento do sistema de equações lineares [Barret 94]. Assim, a aplicação de preconditionamento ao sistema permite atingir velocidades de cálculo superiores às dos métodos directos [Saint-Georges 96]. Neste trabalho, utilizam-se os seguintes preconditionadores: (i) preconditionamento de Jacobi, (ii) preconditionamento de sobre-relaxação sucessiva simétrica (SSOR) e (iii) factorização incompleta de Cholesky [Benzi 02].

Uma das vantagens da utilização do método do GC é o facto de não obrigar ao armazenamento dos coeficientes nulos da matriz \mathbf{A} . Além disso, a simetria desta matriz possibilita ainda o não-armazenamento de uma das suas partes triangulares. Por outro lado, a natureza intrinsecamente paralelizável do método do GC constitui também uma vantagem relevante deste método em relação aos métodos directos.

O método do gradiente conjugado é um método iterativo não-estacionário baseado em subespaços de Krylov [van der Vorst 03]. Com este método, a resolução do sistema de equações 5.1 baseia-se na técnica de projecção ortogonal num subespaço afim

$$\mathbf{x}^{(0)} + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)}) , \quad (5.3)$$

em que $\mathbf{x}^{(0)}$ é uma solução aproximada inicial, $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$ é o subespaço de Krylov gerado por $\{\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^2\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^3\mathbf{r}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{m-1}\mathbf{r}^{(0)}\}$ e $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$ é o resíduo inicial [van der Vorst 03]. Para uma matriz \mathbf{A} simétrica e definida positiva, esta técnica corresponde à minimização da função quadrática [Axelsson 96]

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^T \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) . \quad (5.4)$$

O método do Gradiente Conjugado procura minimizar a função $\varphi(\mathbf{x})$ em cada iteração

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)} , \quad (5.5)$$

em que $\mathbf{x}^{(k)}$ é a solução aproximada actual e α_{k+1} um escalar que actua segundo a direcção de busca $\mathbf{p}^{(k+1)}$ [Reid 71]. O escalar α_{k+1} é definido por

$$\alpha_{k+1} = \frac{[\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)}}{[\mathbf{p}^{(k+1)}]^T \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}}. \quad (5.6)$$

O resíduo actual é $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k)}$, enquanto que o novo resíduo é

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}. \quad (5.7)$$

Estes resíduos correspondem aos gradientes da função quadrática $\varphi(\mathbf{x})$. Sendo as direcções de busca conjugadas² relativamente a \mathbf{A} , $\mathbf{p}^{(k+1)}$ é definida recursivamente por

$$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}, \quad (5.8)$$

em que β_k é um escalar definido por

$$\beta_k = \frac{[\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)}}{[\mathbf{r}^{(k-1)}]^T \mathbf{r}^{(k-1)}}. \quad (5.9)$$

Na tabela 5.2 resume-se o algoritmo de funcionamento do método do gradiente conjugado, em que K_{\max} é o número máximo de iterações.

Embora seja difícil prever a taxa de convergência do método do GC, é possível determinar um limite superior para a norma do erro associada a cada iteração. Este limite relaciona-se com o número de condição espectral³ de \mathbf{A} , designado por $\kappa(\mathbf{A})$. Considerando a norma- \mathbf{A} do vector⁴ $\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$, a taxa de convergência pode ser determinada com a expressão [Ortega 88]

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}} \leq 2 \left[\frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right]^k \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}}. \quad (5.10)$$

De acordo com a expressão anterior, verifica-se que a norma- \mathbf{A} do erro $\mathbf{e}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$ tende para zero quando $k \rightarrow +\infty$. Este facto justifica a natureza iterativa do método do gradiente conjugado [Meurant 99]. Adicionalmente, constata-se que quanto mais próximo for $\kappa(\mathbf{A})$ de 1, maior é a taxa de convergência do processo. O condicionamento consiste na obtenção de um sistema equivalente a 5.1 em que a nova matriz de coeficientes possua um número de condição espectral mais próximo da unidade. Conseguem-se assim taxas de convergência mais elevadas [Benzi 02].

² \mathbf{x} e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ dizem-se conjugados de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simétrica e definida positiva, se são ortogonais em relação ao produto interno $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\mathbf{A}} \doteq \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y}$.

³O número de condição espectral, κ , de uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é o quociente dos valores próprios máximo (λ_{\max}) e mínimo (λ_{\min}) de \mathbf{A} , *i.e.* $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$.

⁴A norma de um vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ em relação à matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simétrica e definida positiva, é $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{A}} \doteq (\mathbf{x}, \mathbf{x})_{\mathbf{A}}^{1/2} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$.

Tabela 5.2: Algoritmo do método do gradiente conjugado.

1. Definir solução inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ 2. Calcular $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$ 3. $k = 0$ 4. REPETIR 4.1 SE $k = 0$ $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)}$ SENÃO Calcular $\beta_k = [\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)} / \{ [\mathbf{r}^{(k-1)}]^T \mathbf{r}^{(k-1)} \}$ Calcular $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}$ FIM SE 4.2 Calcular $\alpha_{k+1} = [\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)} / \{ [\mathbf{p}^{(k+1)}]^T \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)} \}$ 4.3 Calcular $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)}$ 4.4 Calcular $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}$ 4.5 $k = k + 1$ ATÉ à convergência ou $k + 1 = K_{\max}$
--

5.2.4.2 Técnicas de Precondicionamento

O preconditionamento do sistema 5.1 consiste na sua transformação linear de modo a minimizar o número de condição espectral. A aplicação desta técnica ao método do gradiente conjugado permite aumentar a sua eficiência e robustez. Neste contexto, sendo \mathbf{P} não-singular, pode substituir-se o sistema de equações 5.1 por

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{b}. \quad (5.11)$$

$\mathbf{P} = \mathbf{A}$ é o preconditionador ao qual corresponde a taxa de convergência mais elevada [Meurant 99, Benzi 02]. De facto, neste caso resulta que $\kappa(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A}) = 1$. Porém, a determinação de \mathbf{P}^{-1} corresponde à resolução do sistema 5.1, pelo que esta situação não apresenta qualquer vantagem em relação à resolução directa do problema original. No entanto, depreende-se que a matriz \mathbf{P} deva aproximar-se da matriz \mathbf{A} .

Refira-se que, no caso de \mathbf{A} ser simétrica e definida positiva, a matriz de preconditionamento \mathbf{P} deve [Meurant 99]:

1. Ser simétrica e definida positiva;
2. Ter esparsidade semelhante à da matriz \mathbf{A} ;
3. Ser tal que o sistema $\mathbf{P} \mathbf{c} = \mathbf{d}$, com \mathbf{c} e $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, seja de simples resolução;
4. Ser tal que $\kappa(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A})$ seja menor do que $\kappa(\mathbf{A})$.

Porém, a verificação simultânea de todas estas condições gera frequentemente incompatibilidades, pelo que se torna difícil obter um preconditionador globalmente eficiente. O algoritmo geral do método do gradiente conjugado preconditionado é o que se mostra de modo esquemático na tabela 5.3. Para mais informações sobre a utilização de preconditionadores em sistemas lineares de grandes dimensões consultar, por exemplo, o trabalho de Benzi [Benzi 02].

Tabela 5.3: Algoritmo do método do gradiente conjugado preconditionado.

1. Definir solução inicial $\mathbf{x}^{(0)}$
2. $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$
3. $k = 0$
4. REPETIR
4.1 Resolver $\mathbf{P}\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)}$
4.2 SE $k = 0$
$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)}$
SENÃO
Calcular $\beta_k = [\mathbf{z}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)} / \{ [\mathbf{z}^{(k-1)}]^T \mathbf{r}^{(k-1)} \}$
Calcular $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}$
FIM SE
4.3 Calcular $\alpha_{k+1} = [\mathbf{z}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)} / \{ [\mathbf{p}^{(k+1)}]^T \mathbf{A}\mathbf{p}^{(k+1)} \}$
4.4 Calcular $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)}$
4.5 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A}\mathbf{p}^{(k+1)}$
4.6 $k = k + 1$
ATÉ à convergência ou $k + 1 = K_{\max}$

5.2.5 Cálculo Multiescala — Homogeneização por Expansão Assimptótica

O cálculo multiescala realizado neste trabalho baseia-se no método de Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA), exposto detalhadamente no Capítulo 3. Nos pontos seguintes, abordam-se algumas questões relativas à sua implementação.

5.2.5.1 Cálculo do Corrector χ

A solução da equação 3.43 designa-se por corrector (χ) e corresponde aos modos próprios de deformação da geometria representativa analisada [Chung 99b]. As matrizes elementares de deformação e de tensão na microescala são dadas por $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}\mathbf{u}$ e $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\mathbf{B}\mathbf{u}$, respectivamente, com todas as variáveis representadas relativamente à geometria e material da célula representativa unitária (CRU). Deste modo, a aproximação por elementos finitos da

expressão 3.43 resulta em

$$\int_{Y^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY \boldsymbol{\chi} = \int_{Y^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} dY = \mathbf{F}^D, \quad (5.12)$$

onde o superíndice e representa quantidades elementares associadas ao domínio de célula unitária discretizado em elementos finitos (corpo Y) [Chung 01]. Atenda-se ao facto de o corrector $\boldsymbol{\chi}$ corresponder a uma matriz e não a um vector. O segundo termo da equação 5.12 corresponde às colunas de uma matriz \mathbf{F}^D [Chung 01]. As colunas desta matriz constituem seis vectores de força, obrigando ao mesmo número de resoluções do sistema de equações. Por sua vez, as seis soluções constituem as colunas do corrector, sendo cada uma delas um modo próprio de deformação. Note-se que, analisando a definição de \mathbf{F}^D , os vectores de força surgem por integração dos gradientes das propriedades elásticas dos materiais que constituem a célula representativa unitária.

5.2.5.2 Condições de Fronteira Periódicas

As condições de fronteira periódicas são aplicadas aos limites da célula representativa unitária. Para uma célula paralelepipedica em $y_1 \in [0, y_1^0]$, $y_2 \in [0, y_2^0]$ e $y_3 \in [0, y_3^0]$ (ver figura 5.1), impõem-se as seguintes condições:

$$\begin{aligned} \chi_i^{jk}(0, y_2, y_3) &= \chi_i^{jk}(y_1^0, y_2, y_3), \\ \chi_i^{jk}(y_1, 0, y_3) &= \chi_i^{jk}(y_1, y_2^0, y_3) \quad \text{e} \\ \chi_i^{jk}(y_1, y_2, 0) &= \chi_i^{jk}(y_1, y_2, y_3^0). \end{aligned} \quad (5.13)$$

No entanto, de modo a evitar o movimento de corpo rígido, é necessário impor uma restrição aos seis graus de liberdade de um ponto arbitrário na célula representativa unitária. Neste trabalho, esta restrição é imposta actuando apenas sobre os graus de liberdade de translação num único vértice da CRU. O movimento de corpo rígido é assim evitado com as condições de periodicidade que, pelo exposto nas relações 5.13, obrigam a que a esta restrição actue simultaneamente sobre todos os vértices da CRU.

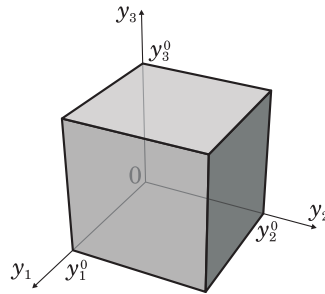


Figura 5.1: Sistema de eixos e limites das coordenadas de uma célula representativa unitária paralelepipedica.

5.2.5.3 Cálculo Numérico da Matriz D Homogeneizada

A matriz de elasticidade homogeneizada, \mathbf{D}^h , é calculada com o método dos elementos finitos a partir da modificação da equação 3.49, resultando em

$$\mathbf{D}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \mathbf{D}^k (\mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k), \quad (5.14)$$

em que Y^k é o volume do elemento k , Y o volume total da geometria e \mathbf{I} a matriz identidade. Se $\boldsymbol{\chi} = \mathbf{0}$, esta equação corresponde à média volúmica das propriedades elásticas dos elementos da microescala.

5.2.5.4 Localização

As deformações da microescala nos pontos de integração de um elemento pertencente à macroescala são (ver equação 3.71)

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{I} - \mathbf{B}^e \boldsymbol{\chi}^e) \boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (5.15)$$

em que o superíndice e denota quantidades elementares microestruturais. As tensões microestruturais podem ser calculadas multiplicando as deformações correspondentes pelas matrizes de elasticidade dos elementos da microescala (ver equação 3.70), isto é,

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{D}^e (\mathbf{I} - \mathbf{B}^e \boldsymbol{\chi}^e) \boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (5.16)$$

Na tabela 5.4 mostra-se o algoritmo simplificado dos ciclos multiescala do programa desenvolvido neste trabalho.

5.3 Geração de Células Representativas Unitárias — O Programa SPHERECELL

Para estudar o comportamento mecânico de materiais heterogêneos como, por exemplo, os materiais compósitos de matriz metálica (CMM), recorre-se frequentemente à utilização de unidades representativas do material e a métodos de homogeneização. Neste trabalho, uma vez que se revelou necessário realizar simulações numéricas sobre uma considerável variedade de células representativas unitárias (CRU), desenvolveu-se um conjunto de algoritmos para gerar automaticamente as geometrias destas células, dando origem ao programa SPHERECELL. A necessidade de recorrer a células representativas unitárias complexas, bem como a uma ampla gama de modelos e especificações geométricas, motiva o desenvolvimento de algoritmos dedicados.

A modelação de CRU requer o controlo rigoroso de alguns parâmetros geométricos como, por exemplo, (i) a fracção volúmica dos materiais constituintes, (ii) a geometria e dimensões do reforço, (iii) a sua distribuição e (iv) as condições de fronteira de periodicidade [Segurado 02, Oliveira 04]. Salientam-se aqui algumas características do programa desenvolvido, subdivididas segundo três modos principais:

- Modelos predefinidos — geração de CRU cúbicas com distribuições predefinidas de partículas esféricas. O programa permite a geração das estruturas Cúbicas de Corpo Centrado (CCC) e Cúbicas de Faces Centradas (CFC), e o controlo quer da fracção volúmica quer da fracção mássica do reforço;

Tabela 5.4: Algoritmo simplificado dos ciclos multiescala do programa 3DFRAN.

1. Iniciar variáveis
2. REPETIR para cada escala
2.1. SE <i>micro</i>
Associar nós para condições de fronteira de periodicidade
SENÃO
Continuar
FIM SE
2.2. Construir rigidez elementar e assemblar para \mathbf{K}^g
2.3. Actualizar \mathbf{K}^g com penalidades
2.4. SE <i>micro</i>
Integrar e Assemblar a matriz \mathbf{F}^D
SENÃO
Continuar
FIM SE
2.5. SE <i>micro</i>
$n_{\text{ciclos}} \leftarrow 6$
SENÃO
$n_{\text{ciclos}} \leftarrow 1$
FIM SE
2.6. REPETIR de 1 a n_{ciclos}
2.6.1 Construir vector de forças
2.6.2 Resolver o sistema de equações
2.6.3 SE <i>micro</i>
Assemblar resultado no corrector (χ)
SENÃO
SAIR do ciclo Repetir
FIM SE
FIM REPETIR
2.7. SE <i>micro</i>
Calcular \mathbf{D}^h a partir de χ
SENÃO
SAIR do ciclo Repetir
FIM SE
FIM REPETIR
3. Cálculo reacções
4. Cálculo deformações e tensões
5. Procedimento de localização

- Geração aleatória — a posição e dimensão das partículas de reforço esférico são geradas de forma aleatória, permitindo obter CRU com características geométricas diferentes. Neste modo, podem gerar-se geometrias com ou sem interferência de partículas de reforço, com limitação superior e/ou inferior do diâmetro das partículas e com controlo do número de elementos de reforço. Pode ainda limitar-se a geração de partículas a regiões predefinidas da CRU;
- Células representativas unitárias com fibras de reforço unidireccionais — a distribuição do reforço pode ser obtida de forma aleatória ou confinada a regiões predefinidas da célula.

É necessário ainda garantir a continuidade geométrica entre cada célula e as células vizinhas, *i.e.* a periodicidade geométrica. Para cada elemento de reforço que intersecte os limites da célula gera-se um conjunto de geometrias idênticas complementares, distribuídas de forma a garantir a continuidade da célula. Na figura 5.2, mostra-se o esquema de geração das partículas complementares.

A geração automática das características geométricas de uma célula representativa unitária completa-se com a geração dos ficheiros de definição geométrica. O programa desenvolvido inclui sub-rotinas de geração de ficheiros ASCII no formato próprio do programa GiD®. A solução encontrada concilia a geração automática de primitivas geométricas com um conjunto de operações úteis disponibilizadas pelo GiD®. Tirando partido da simplicidade na definição de pontos, curvas, superfícies e sólidos do formato GiD® dividem-se as tarefas entre a geração e a associação de primitivas geométricas. Estas primitivas são incorporadas nas especificações das superfícies. Os volumes são definidos recorrendo às superfícies como fronteiras geométricas. Na figura 5.3 mostram-se alguns exemplos de geometrias. A figura 5.3(a) diz respeito a uma célula CCC. A figura 5.3(b) refere-se a uma distribuição controlada de fibras contínuas. Neste último caso os volumes são gerados por extrusão das superfícies (directrizes). Posteriormente, as primitivas geométricas são importadas para o pré-processador do GiD®, onde são conjugadas, recorrendo a operações booleanas entre volumes, de modo a resultar na geometria pretendida. Nas figuras 5.4(a) e (b) mostram-se algumas geometrias obtidas por subtração e intersecção de volumes, respectivamente. As mesmas primitivas geométricas podem usar-se para modelar células representativas unitárias de materiais compósitos ou de materiais porosos como, por exemplo, as espumas metálicas, controlando a densidade do material e o tipo de distribuição dos vazios. O fluxograma geral do programa SPHERECELL é representado na tabela 5.5.

O pós-processamento do programa SPHERECELL consiste no conjunto de operações realizadas sobre a geometria para conduzir a ficheiros de dados utilizados em metodologias de homogeneização. Partindo de células representativas unitárias com partículas de reforço esféricas geram-se automaticamente malhas de elementos finitos tetraédricos. As geometrias de fibras contínuas permitem a geração de malhas estruturadas de hexaedros ou tetraedros. Na figura 5.5 mostram-se alguns exemplos de malhas de elementos finitos geradas sobre geometrias obtidas com o programa SPHERECELL.

5.4 A Sub-Rotina SLAVERY

Para além da periodicidade geométrica das células representativas unitárias (CRU), é necessário garantir que também a deformada seja periódica. Deve existir continuidade entre

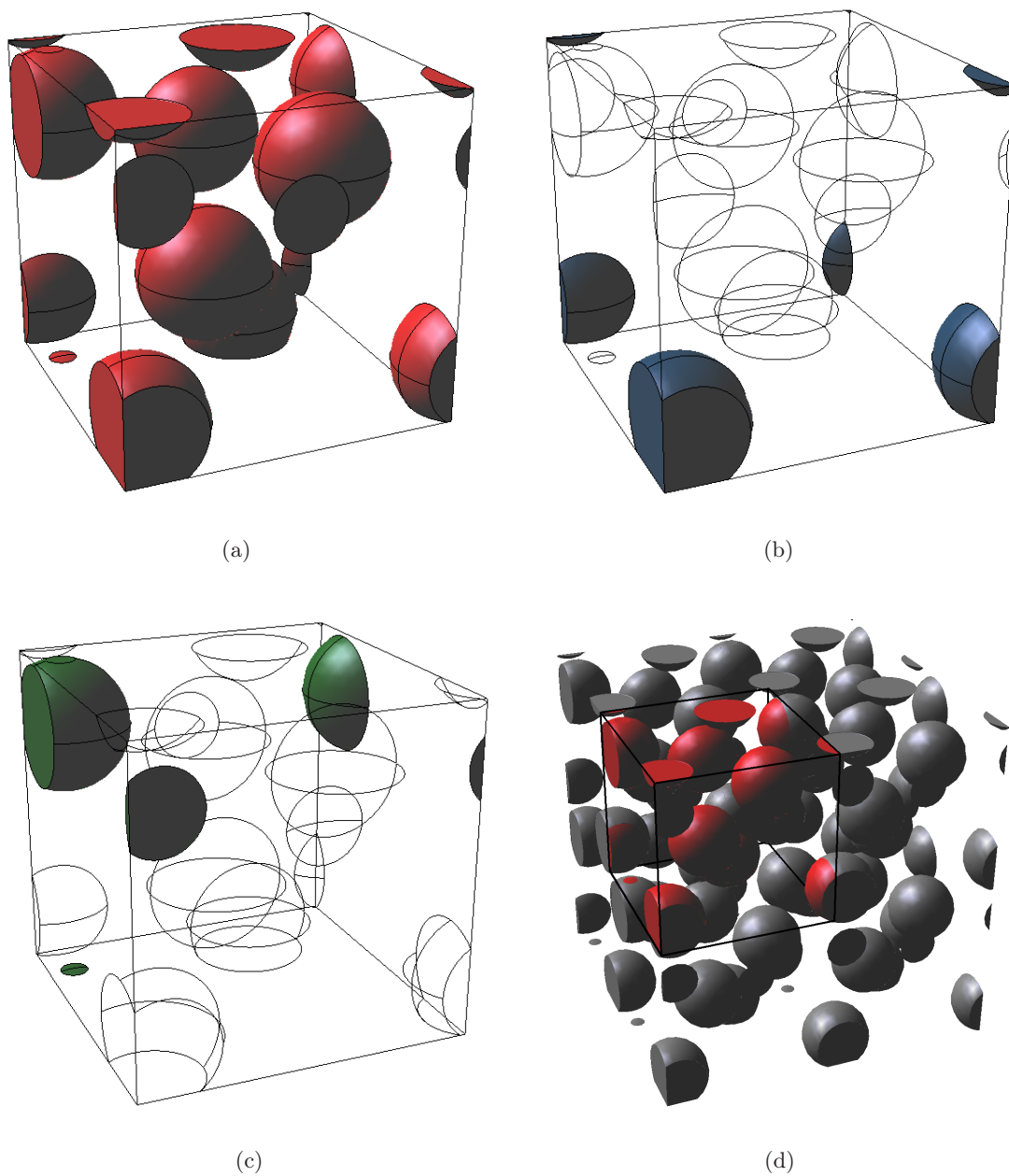


Figura 5.2: Esquema de geração de partículas complementares do programa SPHERECELL: (a) Exemplo de célula representativa unitária (CRU); (b) geração de uma partícula nos vértices da CRU; (c) geração de uma partícula nas faces/arestas da CRU e (d) ilustração da periodicidade.

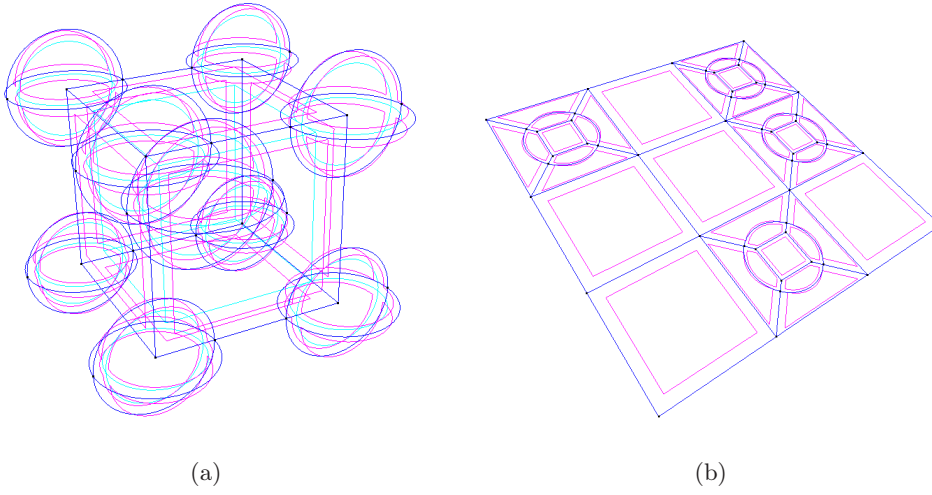


Figura 5.3: Primitivas geométricas geradas de forma automática, para um modelo (a) de esferas e (b) de fibras contínuas.

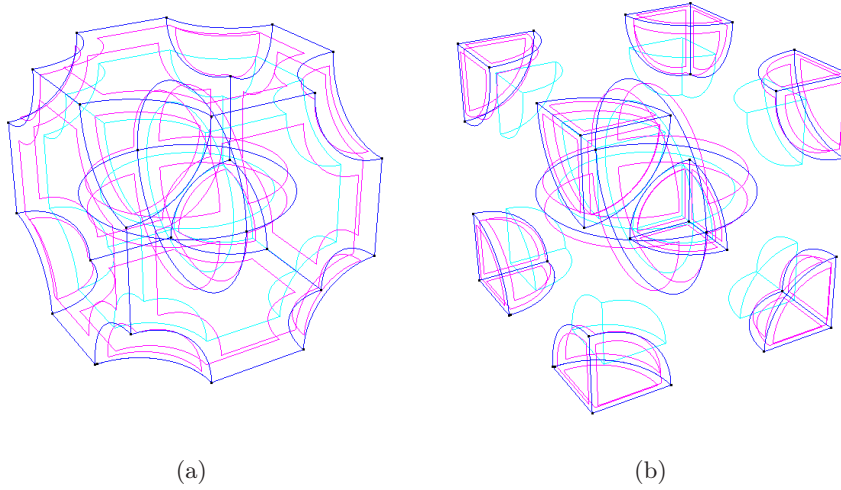


Figura 5.4: Exemplos do resultado de operações booleanas executadas sobre as primitivas geométricas: (a) matriz obtida por subtração e (b) partículas obtidas por intersecção.

Tabela 5.5: Algoritmo de funcionamento do programa SPHERECELL.

- | |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Iniciar variáveis 2. SELECCIONAR opção de geração <ol style="list-style-type: none"> (A) – CFC (B) – CCC (C) – Aleatória 3D (D) – Aleatória 2D (E) – Aleatória 2D (em grelha) 2.1 CASO (A)/(B) <ol style="list-style-type: none"> 2.1.1 Gerar coordenadas do centro das esferas 2.1.2 Definir fracção volúmica (f_v) e relação entre diâmetros 2.1.3 Calcular diâmetros 2.2 CASO (C)/(D) <ol style="list-style-type: none"> 2.2.1 Definir: número de esferas, diâmetros limite e opções de intersecção 2.2.2 REPETIR <ol style="list-style-type: none"> 2.2.2.1 Gerar centros e diâmetros 2.2.2.2 Gerar esferas necessárias à periodicidade 2.2.2.3 Verificar intersecção com esferas existentes ATÉ condições satisfeitas ou limite de iterações 2.2.3 Calcular f_v 2.2.4 Definir novo f_v ou f_w e recalcular diâmetros 2.4 CASO (E) <ol style="list-style-type: none"> 2.4.1 Definir número de fibras e de divisões da grelha 2.4.2 Gerar aleatoriamente regiões ocupadas 2.4.3 Definir directrizes circulares correspondentes 3. Escrever o ficheiro formatado (GiD®) |
|---|

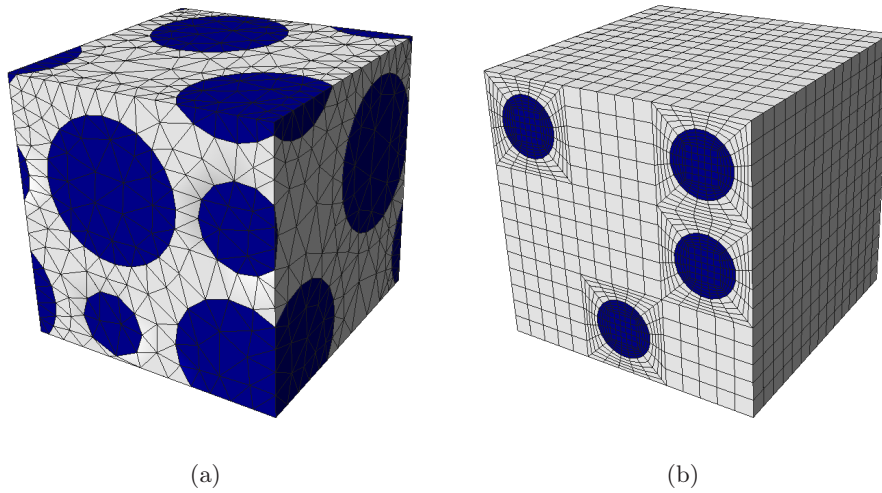


Figura 5.5: Malhas de elementos finitos: (a) não-estruturada de tetraedros e (b) estruturada de hexaedros.

células vizinhas e, conseqüentemente, entre regiões geométricas opostas de uma célula representativa unitária, quer para a geometria original quer para a sua deformada [Böhm 98] (ver figura 5.6). A periodicidade da deformada de uma CRU depende da imposição de condições de fronteira de periodicidade (ver relações 5.13). Assim, os nós das fronteiras geométricas devem ser associados de forma a garantir que os deslocamentos sejam compatíveis com as células vizinhas, *i.e.* com as regiões que, por periodicidade, correspondam às mesmas interfaces de células adjacentes. De forma a automatizar esta associação de graus de liberdade, o programa desenvolvido utiliza a sub-rotina SLAVERY. Esta sub-rotina estabelece índices de associação entre nós pertencentes a fronteiras geométricas de células representativas unitárias de arestas ortogonais.

A associação de nós faz-se em três modos: nos vértices, nas arestas e nas faces (ver figura 5.7). Todos os vértices são associados correspondendo, em termos de periodicidade, aos mesmos pontos em células adjacentes. O mesmo se passa entre arestas paralelas e entre faces paralelas da CRU. Em primeiro lugar, separam-se os nós da malha de elementos finitos segundo o tipo de região a que pertencem: vértices, arestas, faces ou interior da malha. De seguida, distinguem-se nós de controlo (*master*) dos nós dependentes (*slave*). Os nós *master* são os nós pertencentes a elementos geométricos concorrentes com a origem definida para o sistema de coordenadas ortogonais da geometria. Os nós *slave* são os nós pertencentes a elementos geométricos dependentes de cada elemento geométrico *master*. Posteriormente, para cada uma das regiões geométricas *slave*, associa-se cada nó ao nó correspondente na região *master*. Para o efeito, procura-se qual o nó *master* mais próximo de cada um dos nós *slave* e geram-se índices de associação. É com base nestes índices que se impõem as condições de fronteira de periodicidade, as quais correspondem a um caso particular das *Multi-Freedom Constraints* (MFC) referidas na Secção 4.7.2. Neste caso, as condições MFC são homogêneas (do tipo $u_i - u_j = 0$, equivalente a $u_i = u_j$) e impostas em cada um dos três graus de liberdade dos nós associados utilizando o método de

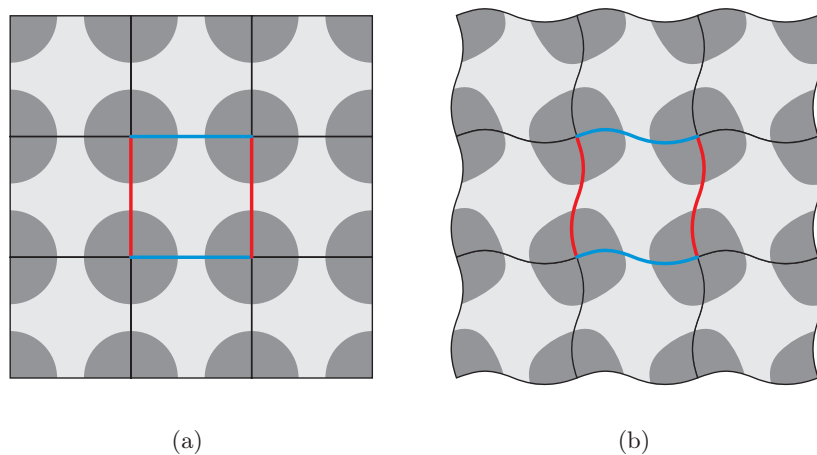


Figura 5.6: Periodicidade de uma célula representativa unitária bidimensional: (a) geometria inicial e (b) deformada.

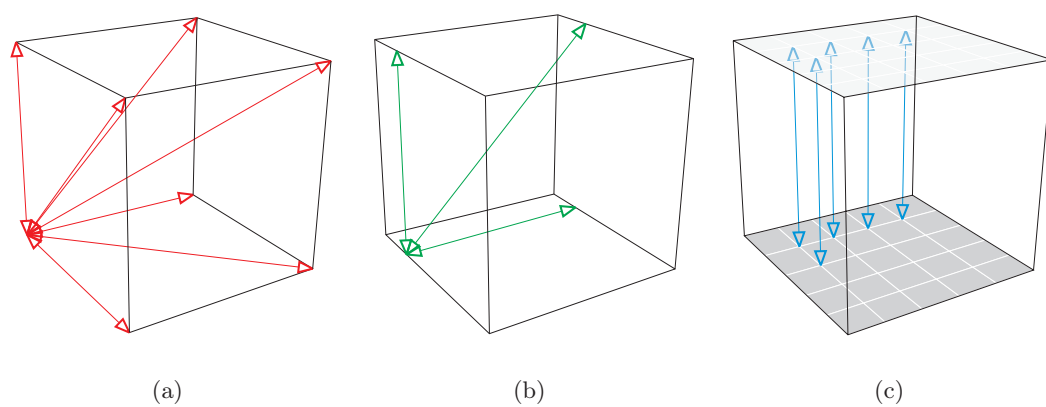


Figura 5.7: Modos de associação de nós em regiões de fronteira da célula representativa unitária: (a) em vértices, (b) em arestas e (c) em faces.

penalidade. O peso de penalidade w_p utilizado é seis ordens de grandeza mais elevado que a norma máxima da matriz de rigidez global. No caso dos vértices, onde os deslocamentos impostos são nulos, opta-se por prescrever directamente o deslocamento, sendo redundante a associação dos nós.

Aquando da imposição de condições de fronteira de periodicidade em malhas estruturadas de elementos finitos é sempre possível encontrar correspondência entre nós *master* e *slave*, por estes se localizarem em lugares geométricos coincidentes. No entanto, tal não é necessariamente verdade no caso de malhas não-estruturadas. Nestas, a distribuição de nós não é necessariamente idêntica em regiões de controlo e em regiões dependentes, como se pode verificar pelo esquema da figura 5.8, onde se mostram duas faces opostas de uma malha de elementos finitos tetraédricos. Consequentemente, é necessário verificar qual o nó *master* mais correcto para controlar o deslocamento de cada nó *slave*. Nas figuras 5.8(a) e (b) mostra-se o esquema de associação entre nós das faces representadas. Quando os desvios são elevados, é necessário garantir que todos os nós têm correspondência. Na realidade, o facto de ser comum a existência de alguns nós *master* sem *slaves* associados, leva a alguns desvios numéricos nos resultados de homogeneização. Nestes casos, a rigidez da célula na região sem associação é processada de modo isolado, sem influência das células vizinhas, o que pode originar picos de deslocamento. Uma solução possível para este problema consiste em associar estes nós a *masters* vizinhos ou a *slaves* mais próximos do lugar geométrico correcto. Garante-se ainda que as associações são feitas dentro de regiões correspondentes ao mesmo material.

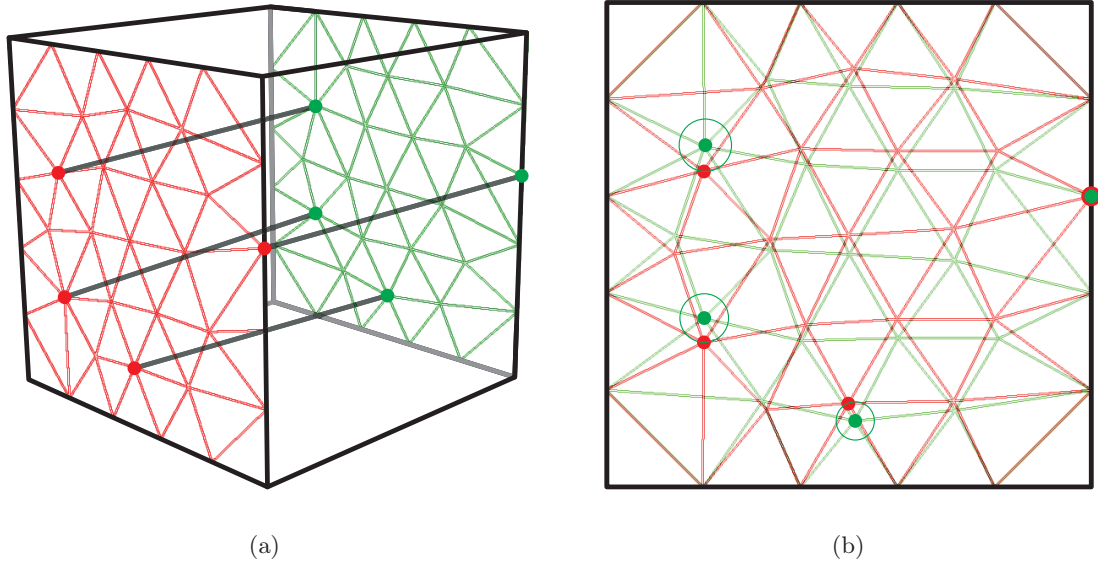


Figura 5.8: Representação esquemática da associação de nós em faces paralelas de malhas não estruturadas: (a) faces *master* (vermelho) e *slave* (verde); (b) representação sobreposta das faces *master* e *slave*.

5.5 Processamento Paralelo

A paralelização do cálculo assume um papel relevante uma vez que determina não só reduções significativas dos tempos de cálculo mas também formas específicas de programação. Nesta secção expõem-se alguns conceitos elementares relativos aos métodos de computação paralela utilizados.

5.5.1 Noções Gerais de Desempenho

Um sistema de computação paralelo pode caracterizar-se segundo vários aspectos. De entre estes, destacam-se a capacidade de processamento, a largura de banda da rede de comunicações, a capacidade de processamento de cada processador, *etc.* A avaliação do desempenho é frequentemente efectuada relacionando os tempos de execução do algoritmo em série e em paralelo. Um dos factores que mais condiciona o desempenho de um computador paralelo é o tempo que os vários processos despendem em comunicações. A comunicação entre processos envolve sempre um custo que se reflecte directamente no desempenho global do sistema. A velocidade a que se efectua a comunicação entre processos é um factor fundamental e que condiciona o tipo de aplicações que podem ser suportadas para uma dada arquitectura paralela. Esta é usualmente quantificada através da latência de comunicação, isto é, o tempo necessário para o transporte de uma mensagem do processo emissor até ao processo receptor.

Os principais parâmetros de desempenho global de um sistema paralelo são o *speed-up* e a eficiência. O *speed-up*, S_p , permite determinar quantas vezes o programa paralelo é mais rápido que a correspondente versão sequencial. É definido pela razão do tempo de execução do algoritmo sequencial, t_s , e o tempo de execução do algoritmo paralelo, t_p , isto é,

$$S_p = \frac{t_s}{t_p}. \quad (5.17)$$

Para um sistema paralelo ideal, constituído por n_p processadores idênticos, tem-se $S_p = n_p$. No entanto, os processadores não consomem tempo unicamente na execução do algoritmo. Parte é despendida noutras tarefas como, por exemplo, na comunicação entre os processadores. A eficiência, e_p , é um parâmetro que indica o grau de aproveitamento dos recursos de processamento. Corresponde à fracção de tempo despendido pelos processadores exclusivamente na execução do algoritmo. Este parâmetro é definido como

$$e_p = \frac{S_p}{n_p}. \quad (5.18)$$

Um sistema paralelo ideal apresenta uma eficiência $e_p = 1$. No entanto os sistemas reais apresentam geralmente valores de *speed-up* inferiores a n_p e eficiências inferiores a 1.

Uma das características do *speed-up* é o facto de se encontrar limitado pela fracção executada de modo sequencial num sistema paralelo. De facto, seja um programa constituído por uma parte intrinsecamente sequencial, *i.e.* não-paralelizável, com um tempo de execução t_s , e uma parte susceptível de ser paralelizada, com um tempo de execução t_p . As fracções de tempo de execução das partes paralelizável, P , e não-paralelizável, S ,

podem ser definidas como

$$P = \frac{t_p}{t_s + t_p}, \quad (5.19)$$

e

$$S = 1 - P, \quad (5.20)$$

respectivamente. Considere-se, por hipótese, que a execução num computador com n_p processadores da parte susceptível de ser paralelizada decorre de modo ideal, ou seja, originando um *speed-up* igual a n_p . De acordo com a lei definida por Amdahl [Amdahl 67], o *speed-up* associado à execução do programa é

$$S_p = \frac{n_p}{1 + S(n_p - 1)}. \quad (5.21)$$

Desta expressão pode concluir-se que o máximo valor do *speed-up* é $1/S$, com $n_p \rightarrow +\infty$. A lei de Amdahl mostra que para se obterem ganhos elevados em aplicações paralelas é necessário reduzir os blocos sequenciais que compõem o algoritmo. Além disso, esta lei permite predeterminar o desempenho que se pode obter a partir da paralelização de um dado algoritmo.

Outro conceito útil é o da granularidade (*granularity*), que caracteriza o grau de interacção de um determinado processo. Consiste no número de instruções executadas por cada operação de comunicação [Ibbet 89, Stone 93]. Entre duas operações de comunicação consecutivas diz-se que o processo executa um grão de actividade. Um processo que comunica com muita frequência é constituído por grãos de poucas instruções e apresenta, portanto, uma granularidade fina. Pelo contrário, processos em que a interacção é reduzida apresentam uma granularidade grossa [Martins 99]. Em alguns sistemas paralelos, verifica-se ser possível manter a eficiência constante aumentando simultaneamente o número de processadores e a dimensão do problema (grão computacional). Esta capacidade é denominada por expansibilidade (*scalability*) do sistema paralelo. Deste modo, um sistema paralelo expansível permite que se aumente o *speed-up* em proporção directa ao número de processadores.

A resolução de sistemas de grande dimensão leva à existência de um maior grão computacional, diminuindo a influência da latência de comunicação no desempenho do processo paralelo. De facto, o aumento do tempo despendido na execução de instruções nos processadores num grão de actividade diminui a fracção de tempo consumido em tarefas de comunicação, podendo mesmo levar a um aumento da eficiência do sistema paralelo. Tal pode ser verificado quando se utiliza a decomposição do domínio [Smith 96], que consiste na divisão do domínio de cálculo em partições relativas a cada um dos processadores. Assim, quer a construção do sistema quer o esforço computacional despendido na sua resolução podem ser divididos pelos diferentes processadores [Kim 03]. Neste caso, a relação entre os tempos despendidos pelos processadores na execução de instruções num grão de actividade e numa comunicação pode ser vista como uma razão entre um volume e uma área de superfície. Esta razão pode ser mais facilmente visualizada considerando que domínio é a malha de elementos finitos do problema. Neste caso, o volume de cada domínio é a parte da malha que corresponde a determinado processador e a superfície são os graus

de liberdade partilhados. De facto, aquando da utilização da decomposição numérica de domínio, a comunicação ocorre entre as fronteiras dos vários subdomínios computacionais afectos a cada processador. Por outro lado, o número de instruções executadas por um determinado processador é proporcional ao volume de dados computacionais do subdomínio que a ele se encontra associado. Consequentemente, em computação paralela é muito importante o modo como se processa a decomposição de domínios. A utilização de algoritmos pouco eficientes pode comprometer a eficiência de todo o processamento paralelo, quer pela dimensão relativa dos domínios e das suas fronteiras quer pela forma como é dividido o sistema de equações. A malha de elementos finitos tem de ser distribuída pelos vários processadores de modo a que (i) o número de elementos seja idêntico em todos eles e (ii) o número de elementos adjacentes a fronteiras comuns seja mínimo. O objectivo da primeira condição é dividir de forma equitativa o peso computacional pelos vários processos. Com a segunda condição pretende-se minimizar as comunicações que resultam da interacção entre processadores nas fronteiras dos subdomínios [Karypis 98].

Neste trabalho, a decomposição de domínios é efectuada e optimizada recorrendo à livreria METIS [Karypis 98]. Refira-se que a única limitação encontrada na sua utilização diz respeito ao facto de as sub-rotinas utilizadas apenas suportarem malhas de elementos finitos com elementos lineares (hexaedros de 8 nós e tetraedros de 4 nós). Porém, para a decomposição de domínios de elementos quadráticos basta executar os procedimentos de decomposição com malhas adaptadas, onde se incluem apenas o nós dos vértices.

5.5.2 *Cluster Beowulf*

As diferentes arquitecturas de computação paralela podem ser classificadas de acordo com aspectos como, por exemplo, o modelo de controlo, o tipo de processador, o modelo de memória ou a topologia da rede de comunicações. No entanto, a enorme diversidade de arquitecturas existentes impossibilita uma classificação universal, pelo que várias taxinomias têm vindo a ser propostas [Skillicorn 88, Dasgupta 90, Duncan 90, Almasi 94]. No entanto, a mais célebre foi desenvolvida em 1966 por Flynn [Flynn 66]. De acordo com Flynn [Flynn 66, Flynn 72] as arquitecturas computacionais classificam-se com base na relação existente entre fluxos de dados e fluxos de instruções⁵. Desta classificação resultam as seguintes categorias: *Single Instruction stream/Single Data stream* (SISD), *Single Instruction stream/Multiple Data streams* (SIMD), *Multiple Instruction streams/Single Data stream* (MISD) e *Multiple Instruction streams/Multiple Data streams* (MIMD).

O tipo de arquitectura utilizada neste trabalho é o de fluxos múltiplos de instruções/fluxos múltiplos de dados (MIMD). Tal consiste em computadores com múltiplos processadores que executam, de forma simultânea e independente, diferentes fluxos de instruções sobre distintos fluxos de dados. Segundo a taxonomia de Duncan [Duncan 90], a classe MIMD pode ser subdividida em sistemas de memória partilhada (multiprocessadores) e de memória distribuída (multicomputadores). A existência de um espaço de endereçamento comum para todos os processadores define uma máquina de memória partilhada. Pelo contrário, o sistema diz-se de memória distribuída se cada processador possui um espaço de endereçamento próprio.

Os estudos de desempenho efectuados neste trabalho são executados em máquinas de

⁵O fluxo de instruções é a “sequência de instruções executadas pela máquina” e o fluxo de dados é a “sequência de dados utilizada pelo fluxo de instruções” [Flynn 66].

memória distribuída, ou multicomputadores. Estes sistemas caracterizam-se por terem unidades de memória associadas a cada processador. Cada processador pode aceder exclusivamente à sua memória local. A partilha de informação é levada a cabo através da comunicação entre os vários processadores. Os multicomputadores são constituídos por um conjunto de nós interligados por uma rede de comunicações, em que cada nó corresponde a um computador autónomo. A utilização deste tipo de sistema revela-se vantajosa na resolução de problemas em que não seja exigido grande fluxo de comunicações, sendo a maior parte do processamento executada localmente, sem conflitos de acesso a memória e sem necessidade de mecanismos de sincronização para garantir a coerência dos dados em memória. A expansibilidade dos sistemas de multicomputadores depende, essencialmente, da latência de comunicação associada à rede de comunicação.

O tipo de máquina utilizada no presente trabalho corresponde a um tipo específico de arquitectura MIMD: o *cluster*⁶ Beowulf. Este consiste num sistema de processamento distribuído baseado em *hardware* convencional. É assim possível tornar economicamente acessíveis os desempenhos característicos de supercomputadores. Um *cluster* Beowulf é um conjunto de computadores pessoais (PC) interligados por uma LAN (*Local Area Network*), controlados por um sistema operativo *open source* (e.g. Linux) e que executam aplicações paralelas programadas com protocolos globais de troca de mensagens [Sterling 99, Sonzogni 02]. O *cluster* Beowulf é constituído por diversos nós *slave*, controlados por um só nó *master* (ver figura 5.9). Um tal sistema pode ser expandido facilmente.

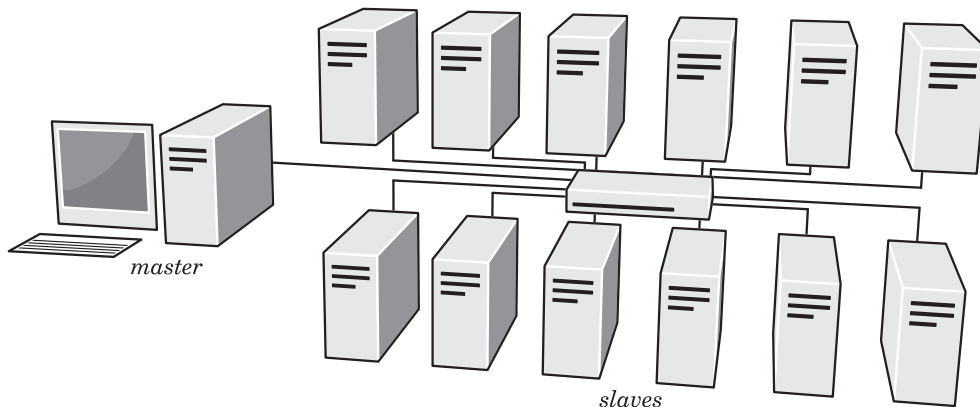


Figura 5.9: Representação esquemática de um *cluster* do tipo Beowulf.

5.5.3 Interface de Passagem de Mensagens (MPI)

O MPI é uma biblioteca de funções para troca de mensagens, com a qual se pretende estabelecer uma norma de desenvolvimento de programação paralela. O MPI reúne as características mais funcionais de outras livrarias de passagem de mensagens como, por exemplo, a PVM [Sunderam 90, Geist 94], a P4 [Butler 92], a Chameleon [Gropp 93] e a PICL [Geist 90]. O sistema resultante designa-se por MPICH, que corresponde ao acrónimo de *Message-Passing Interface Chameleon* [Gropp 93, Gropp 96, Gropp 01]. O MPICH

⁶Um *cluster* é um *aglomerado* de computadores independentes unificados num sistema de computação paralela através de *software* e de uma rede dedicada.

é uma biblioteca de funções que permite, de forma modular, obter um elevado desempenho em supercomputadores ou sistemas de elevada capacidade de processamento.

As funções de MPI podem ser divididas em dois grupos. O primeiro grupo contém as sub-rotinas de gestão, responsáveis pela iniciação, contagem, identificação e finalização de processos paralelos. O segundo grupo é constituído pelas sub-rotinas de comunicação, destinadas à troca de mensagens ou ao sincronismo entre os vários processos que cooperam na resolução de um problema. Todos os aspectos relevantes da utilização da biblioteca MPI podem ser consultados em detalhe na documentação do *Message Passing Interface Forum* [MPIF 94].

5.5.4 Sistema de Equações

O sistema de equações é construído localmente, isto é, em cada nó é construída apenas a parte do sistema de equações respeitante a cada subdomínio. Apesar de ser possível construir todo o sistema no nó *master* e fazer a posterior comunicação aos nós responsáveis por cada um dos subdomínios, a opção implementada é significativamente mais eficiente [Kim 03]. Na realidade, para além de se reduzir a quantidade de memória computacional exigida, esperam-se, nesta etapa, eficiências próximas de 1. Este processo é perfeitamente expansível pelo facto de quer a formulação elementar quer a maior parte da assemblagem poderem ser realizadas sem necessidade de comunicação entre os diferentes processos. A gestão das condições de fronteira também é realizada localmente.

Uma das características do método do gradiente conjugado é o facto de não ser essencial assemblar globalmente a matriz de coeficientes, sendo apenas necessários os resultados das multiplicações de matrizes por vectores e dos produtos internos envolvidos no método. É por esta razão que os subdomínios podem ser tratados independentemente em cada um dos processos. Neste sentido, a única troca de informação entre diferentes processos, no que diz respeito à definição do sistema, consiste em completar as partes do sistema relativas a graus de liberdade das fronteiras dos domínios. Assim, cada processo precisa de assemblar, também, a influência da rigidez dos elementos pertencentes aos outros subdomínios com conectividade em nós de fronteiras comuns. Esta operação é feita apenas no início da fase de resolução.

Em termos de processamento paralelo, em cada iteração existem apenas dois tipos de operações relevantes, os produtos internos e as multiplicações de matrizes por vectores [Kim 03]. No entanto, em cada processo, estas operações são executadas de forma independente sobre o subdomínio respectivo. Na realidade, o método do GC paralelizado tem um funcionamento idêntico ao da versão em série, sendo apenas necessário influenciar os diferentes subdomínios com a mesma direcção de busca para garantir que as várias partes do sistema reajam como se fossem processadas pelo mesmo processador. Assim, as actualizações dos vectores \mathbf{x} e \mathbf{r} são realizadas em cada processador (ver equações 5.5 e 5.7). Em cada iteração, a convergência do processo é influenciada pelos coeficientes globais α e β (ver tabela 5.2), calculados pelos produtos internos envolvendo os vectores de resíduo e as direcções de busca. Em rigor, estes constituem os dois pontos de sincronização dos processos paralelos, sendo os que requerem comunicações colectivas. Contudo, estas comunicações envolvem apenas os escalares provenientes dos produtos internos realizados em cada processador, sendo somados em todos os processadores. Em cada iteração é ainda necessário resolver o produto $\mathbf{A}\mathbf{p}$ que, mais uma vez, apresenta a vantagem de não necessitar

do armazenamento explícito da matriz global, apenas da obtenção da parte do resultado respeitante a cada processador.

Parte II

Resultados

Capítulo 6

Resultados e Aplicações

6.1 Introdução

Neste capítulo começa-se por fazer uma apreciação do desempenho global do programa desenvolvido utilizando apenas uma escala. Resolvem-se problemas com solicitações comuns e comparam-se os resultados obtidos com soluções analíticas. Assim, os três primeiros ensaios são triviais — tracção uniaxial, corte puro e flexão —, sendo efectuados apenas com o intuito de verificar o funcionamento do programa de simulação numérica com o método dos elementos finitos. Neste sentido, estuda-se também a convergência de malha e comparam-se os resultados obtidos com os diferentes elementos finitos implementados. Como exemplo de aplicação mais geral do cálculo com uma escala, procede-se ainda à simulação de um problema de concentração de tensões. São também realizados estudos de desempenho em processamento paralelo.

Numa segunda fase, isola-se o cálculo da microescala para determinar a eficiência do procedimento de homogeneização por expansão assintótica. Analisam-se também os resultados do procedimento SLAVERY, assim como o procedimento geral de homogeneização com malhas não-estruturadas. Verifica-se ainda a aplicação do programa SPHERECELL recorrendo a um estudo multiescala com várias células representativas unitárias de esferas geradas aleatoriamente, com diferentes fracções volúmicas de reforço e malhas não-estruturadas de tetraedros.

Por último, procede-se à análise do comportamento mecânico macroestrutural de um provete de material compósito de matriz metálica, num cálculo multiescala com homogeneização.

6.2 Validação Numérica — Macroescala

Para os ensaios de validação na macroescala, utilizou-se uma liga de Alumínio AlMgSi para trabalho mecânico endurecida por tratamento térmico do tipo T6 (designação AISI-SAE 6082) [Smith 98]. A composição da liga e as suas propriedades mecânicas mais relevantes são apresentadas nas tabelas 6.1 e 6.2 [ASM 90, Pinho-da-Cruz 03], respectivamente.

Considera-se que o comportamento do material é linear elástico em todo o domínio das aplicações consideradas. No primeiro problema estuda-se a tracção uniaxial de um bloco de secção quadrada ($20 \times 20 \times 40$ [mm³]), representado esquematicamente na fi-

Tabela 6.1: Composição química (% mássica) da liga AlMgSi1.

Si	Mg	Mn	Fe	Cu	Zn	Cr	Ti	Al
1,05	0,80	0,68	0,26	0,04	0,02	0,01	0,01	rp.100

Tabela 6.2: Propriedades mecânicas da liga AlMgSi1.

Propriedade	Valor
Tensão limite de elasticidade [MPa]	300
Módulo de elasticidade [GPa]	70
Coefficiente de Poisson	0,32

gura 6.1. Utilizam-se condições de fronteira de simetria nos planos Oxy , Oyz e Oxz . Na extremidade livre, paralela ao plano Oxy , prescreve-se um deslocamento $d_z = 0,1$ mm na direcção Oz . A tensão normal resultante deve ser $\sigma_z = 350$ MPa. Os resultados numéricos, independentemente do tipo de elementos e para qualquer nível de refinamento de malha testado, correspondem exactamente ao valor teórico. Este caso serve essencialmente como primeiro indicador da qualidade das aproximações obtidas numericamente. São, no entanto, necessários ensaios mais complexos para aferir a qualidade dos resultados.

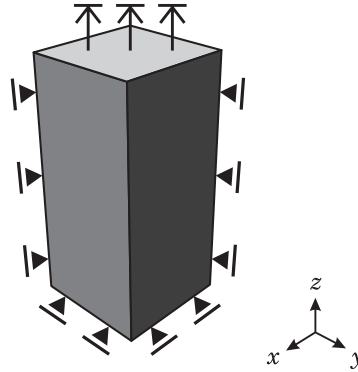


Figura 6.1: Definição do problema de tracção uniaxial, com ilustração das condições de fronteira.

No segundo teste realiza-se um ensaio de corte puro. Como se pode verificar na figura 6.2(a), o problema consiste na fixação de uma das extremidades do provete e imposição de um deslocamento $d_z = 1$ mm na extremidade oposta, na direcção correspondente à maior dimensão nesse plano. O provete tem dimensões de $10 \times 1 \times 80$ [mm³]. Estas dimensões foram escolhidas de forma a obter uma zona útil suficientemente grande. A malha de elementos finitos foi refinada nas extremidades livres do provete, de modo a representar correctamente os gradientes de tensão desenvolvidos nessa zona. Como se pode observar nos resultados apresentados na figura 6.2(b), o campo de tensões de corte é constante na zona útil do provete. O valor destas tensões pode ser calculado analiticamente como $\tau_{xz} = G\gamma_{xz}$, em que $\gamma_{xz} = \arctan\left(\frac{0,1}{10}\right) \approx 0,01$ rad, ou seja, $\tau_{xz} = 265,1$ MPa. Os

resultados numéricos, obtidos para malhas de cada um dos tipos de elementos finitos implementados, são os indicados na tabela 6.3. Os erros obtidos na aproximação numérica à solução analítica são sempre inferiores a 0,05%, verificando-se que a dependência do grau de refinamento da malha é diminuta. Os elementos quadráticos originam aproximações ligeiramente melhores. Ainda assim, com diferenças inferiores a 0,04% em relação aos elementos lineares correspondentes. Os resultados apresentados na tabela 6.3 são valores médios, representativos de valores com variações inferiores a 0,01%.

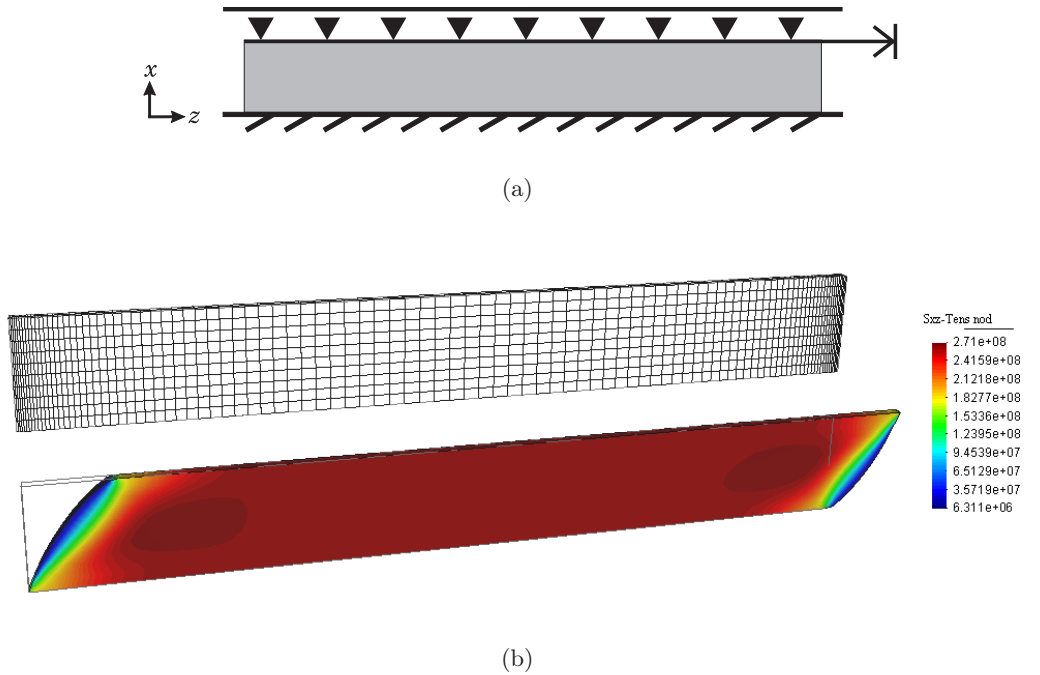


Figura 6.2: Definição do problema de corte, com (a) ilustração das condições de fronteira e (b) representação da malha de elementos finitos de hexaedros lineares e deformada com isovalores de tensão de corte τ_{xz} .

Tabela 6.3: Tensão de corte τ_{xz} na zona útil do provete de corte.

Elementos Finitos	τ_{xz} [MPa]
Hexaedros lineares	265,2
Tetraedros lineares	265,2
Hexaedros quadráticos	265,1
Tetraedros quadráticos	265,1

O terceiro ensaio realizado consiste na flexão de uma viga encastrada por acção de uma força distribuída na extremidade oposta ao encastramento. A definição do problema é ilustrada na figura 6.3. As dimensões do provete são $10 \times 100 \times 10$ [mm³] e o carregamento aplicado é $F_z = 500$ N. A solução analítica para a deflexão w na extremidade livre da viga

é [Silva 99]

$$w_z = \frac{F_z L^3}{3EI_x}, \quad (6.1)$$

em que L é comprimento da viga e I_x é o momento de inércia da secção transversal em torno de Ox . Substituindo os valores numéricos correspondentes, a solução analítica para a deflexão na extremidade livre da viga é $w = 2,857$ mm.

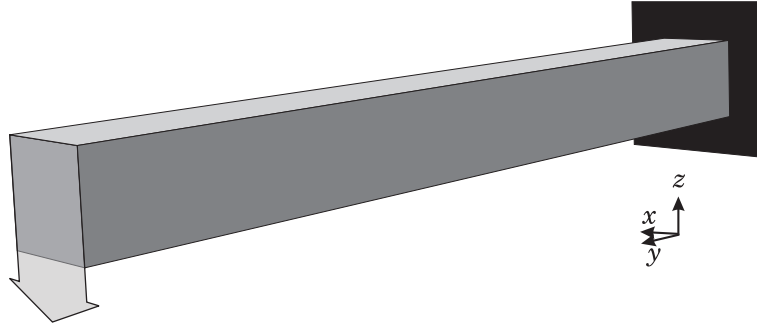


Figura 6.3: Definição da geometria e condições de fronteira do problema de flexão.

De modo a aferir o rigor da aproximação numérica, realiza-se um estudo de convergência de malha para cada tipo de elemento finito utilizado, *i.e.* hexaedros lineares simples (HEX8) e com integração reduzida (método $\bar{\mathbf{B}}$ – HEX8bb), hexaedros quadráticos (HEX20), tetraedros lineares (TET4) e tetraedros quadráticos (TET10). Nos gráficos das figuras 6.4 a 6.6 mostram-se os resultados obtidos neste estudo. Na figura 6.4 apresenta-se a evolução da solução numérica com o número de graus de liberdade, para malhas de diferentes tipos de elementos finitos. Esta avaliação é complementada nas figuras 6.5 e 6.6, onde se representa a evolução do erro dos resultados numéricos relativamente à solução analítica e em relação à solução obtida para a malha anterior em termos de grau de refinamento, respectivamente. No gráfico da figura 6.4 são evidentes duas tendências distintas. Por um lado, obtém-se uma aproximação mais gradual à solução analítica no caso de elementos lineares, efeito especialmente evidente para os elementos tetraédricos. Verifica-se também que a convergência com elementos hexaédricos de 8 nós com integração reduzida se faz por valores superiores à solução analítica. Este efeito pode explicar-se pelo tipo de integração e pela alteração da componente hidrostática da rigidez dos elementos, que origina uma diminuição da rigidez global da estrutura. Este efeito é mais evidente para malhas com menor número de elementos. Por sua vez, os elementos quadráticos revelam-se mais estáveis, originando resultados próximos da solução analítica mesmo para um número reduzido de graus de liberdade. Tais resultados podem explicar-se pelo facto se utilizarem elementos com funções de forma de continuidade C^1 , tal como na formulação de Euler-Bernoulli. Na figura 6.5, mostram-se os erros relativos das soluções numéricas, em relação à solução analítica. É possível verificar as referidas tendências, com os elementos quadráticos a originarem, mesmo para malhas de elementos finitos grosseiras, aproximações com erros sempre inferiores a 2%. Os elementos lineares têm uma aproximação mais gradual à solução analítica, mostrando uma maior dependência do grau de refinamento da malha. Neste

caso, os elementos hexaédricos lineares com integração reduzida selectiva permitem obter uma aproximação mais próxima da que se obtém com elementos quadráticos. Adicionalmente, é perceptível a melhor aproximação alcançada com hexaedros quando comparados com tetraedros de grau idêntico. No entanto, as complexidades de geração de malha inerentes à utilização de elementos hexaédricos podem justificar a utilização de tetraedros, especialmente de tetraedros de grau superior. Neste caso, o facto de a integração elementar se tornar computacionalmente mais dispendiosa torna-se irrelevante ao se concluir que o cálculo se pode efectuar com recurso a malhas mais grosseiras, isto é, com menor número de graus de liberdade. Na figura 6.6 mostra-se a evolução do erro relativo, calculado entre as soluções de dois níveis de refinamento de malha consecutivos, com o número de nós da malha de elementos finitos. Mais uma vez, verifica-se a estabilidade dos elementos quadráticos neste problema, sendo os erros relativos reduzidos, de valor próximo ou inferior a 1%. Mostra-se também a rápida convergência dos elementos hexaédricos de 8 nós com integração reduzida selectiva, aproximando-se dos resultados obtidos com elementos quadráticos.

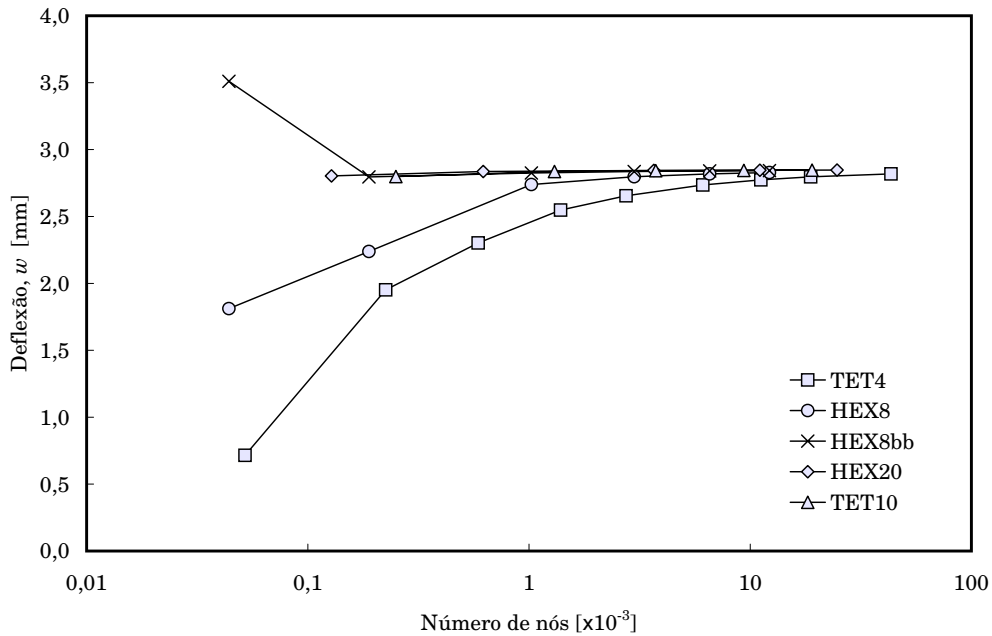


Figura 6.4: Evolução da solução numérica com o número de nós, para malhas de diferentes elementos finitos.

As malhas consideradas ideais após o estudo de convergência são as representadas na figura 6.7. As suas características estão listadas na tabela 6.4. Para escolher estas malhas analisou-se a estabilidade do processo de convergência, sendo o critério de selecção a obtenção de um erro relativo, em termos de operações de refinamento, inferior a 1%. Na figura 6.8 mostram-se os resultados obtidos para uma malha de elementos finitos hexaédricos lineares. Nestes resultados é evidente o perfil de tensões normais σ_y , onde são perceptíveis as regiões de tracção e compressão, assim como o plano neutro.

O quarto teste de validação consiste no estudo da concentração de tensões numa placa

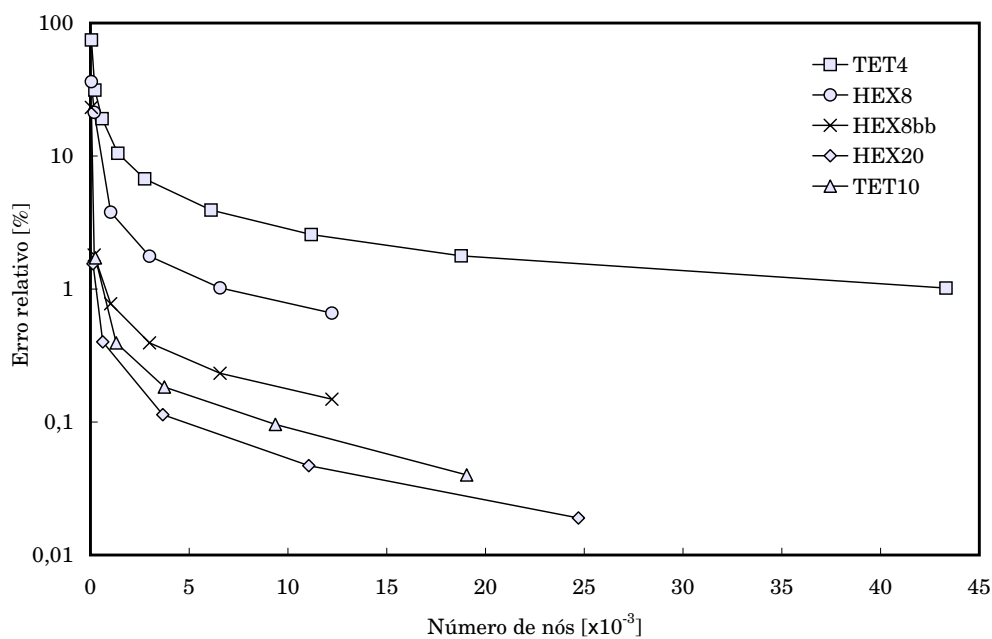


Figura 6.5: Evolução do erro relativo, em relação à solução analítica, com o número de nós para cada tipo de elemento finito.

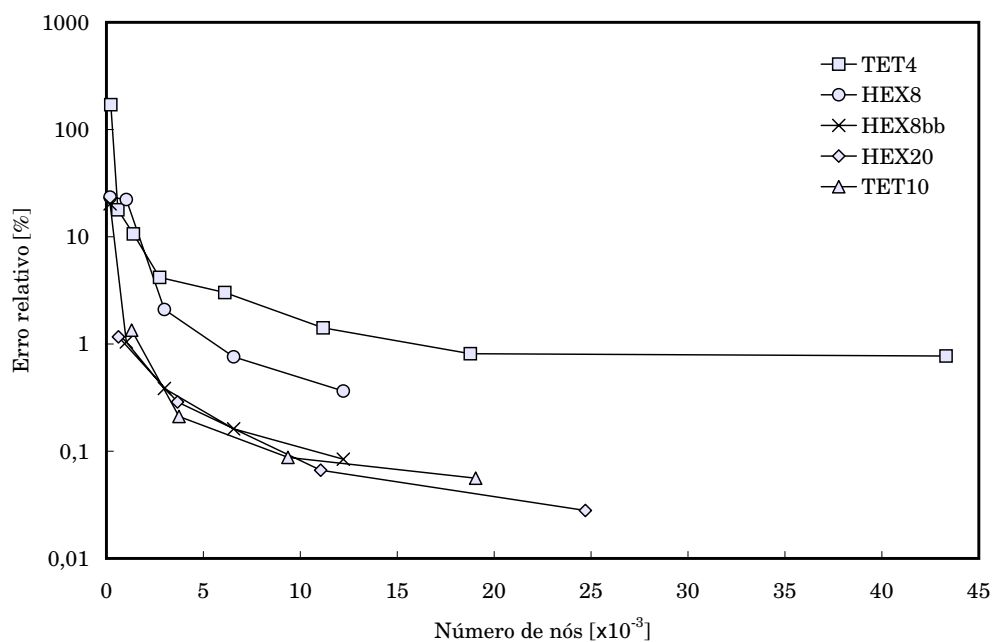


Figura 6.6: Evolução do erro relativo, calculado entre as soluções de dois níveis de refinamento consecutivos, com o número de nós para cada tipo de elemento finito.

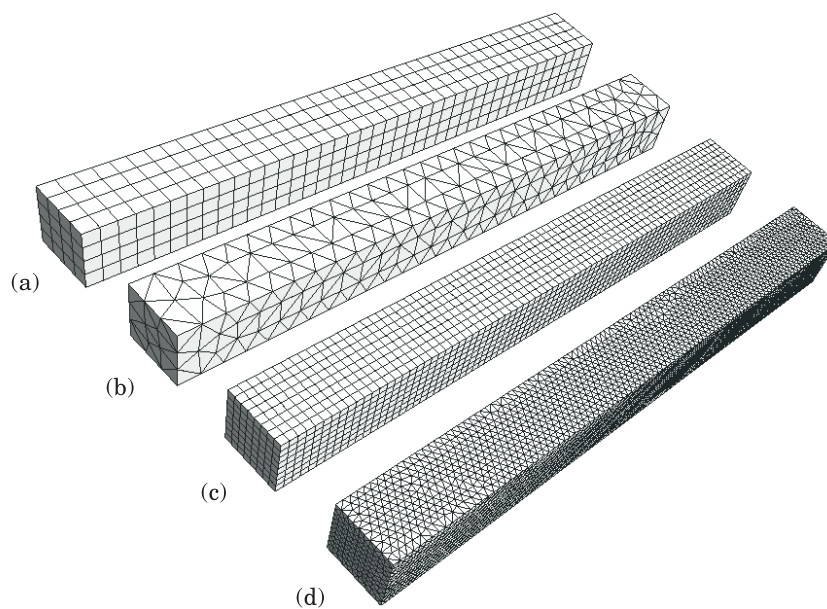
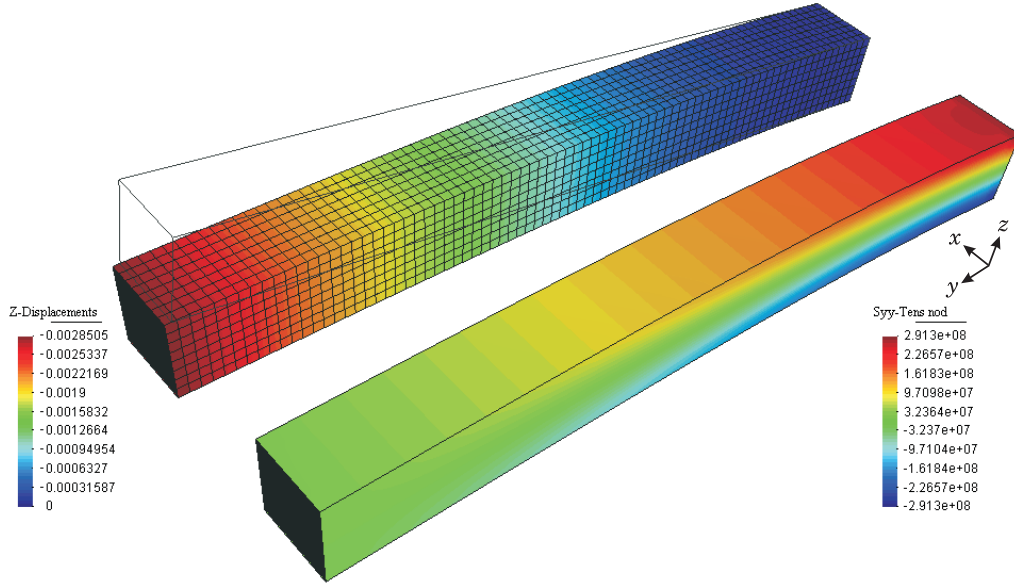


Figura 6.7: Malhas de elementos finitos ideais utilizadas no cálculo do problema de flexão: (a) hexaedros de 20 nós, (b) tetraedros de 10 nós, (c) hexaedros de 8 nós e (d) tetraedros de 4 nós.

Tabela 6.4: Malhas ideais para cada um dos tipos de elemento finito.

	HEX8	HEX8bb	TET4	HEX20	TET10
Número de elementos	5120	640	96903	640	2198
Número de nós	6561	1025	18772	3665	3741
Erro relativo [%]	0,76	0,78	0,81	0,28	0,21


 Figura 6.8: Isovalores de deslocamento na direcção Oz e de tensão normal σ_y .

rectangular fina com um furo circular. Na figura 6.9 mostra-se uma representação esquemática da definição deste teste, com a ilustração das condições de fronteira e de uma das malha de elementos finitos utilizadas, assim como um pormenor do refinamento local de malha de elementos finitos na região de gradientes mais acentuados de tensão. Uma vez que quer a geometria quer o carregamento apresentam simetria longitudinal (segundo Oy) e transversal (segundo Ox), considera-se apenas um quarto da geometria para a modelação por elementos finitos. O provete consiste numa placa com largura $l = 150$ mm, espessura $e = 1$ mm e um furo de diâmetro $D = 15$ mm. O factor de concentração de tensões, K_{tg} , corresponde ao caso de uma placa de largura finita, com parâmetro $\phi = D/l = 0,1$ e pode ser calculado da seguinte forma [Pilkey 97]

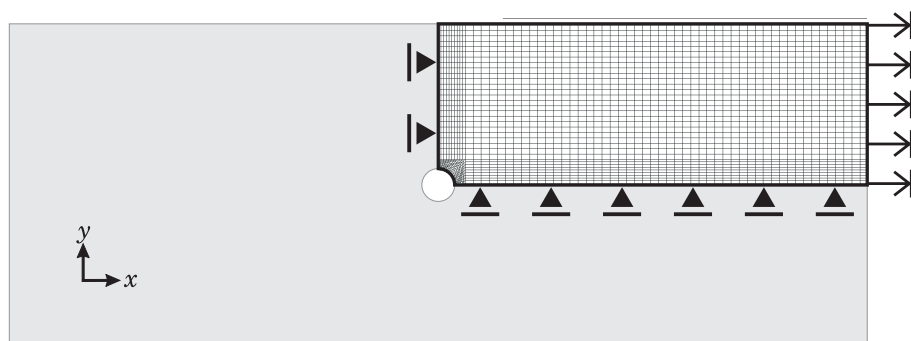
$$K_{tg} = 0,284 + \frac{2}{1-\phi} - 0,600(1-\phi) + 1,32(1-\phi)^2, \quad (6.2)$$

de onde resulta $K_{tg} = 3,035$. O ensaio realiza-se impondo um deslocamento prescrito $d_x = 1$ mm na face livre paralela a Oy . Os valores de tensão nesta zona mais afastada do furo são importantes pelo facto de representarem a tensão nominal, livre de efeitos de concentração de tensões. Assim, quanto mais homogénea for a distribuição de tensões nesta zona, menor será a necessidade de refinamentos de malha. Na região do furo o efeito é o oposto. Devido à existência de gradientes acentuados de tensão, torna-se necessário refinar localmente a malha de elementos finitos (ver figura 6.9(b)) de forma a melhorar a aproximação das concentrações de tensão obtidas à superfície. Estas duas regiões permitem determinar numericamente o factor de concentração de tensões de acordo com

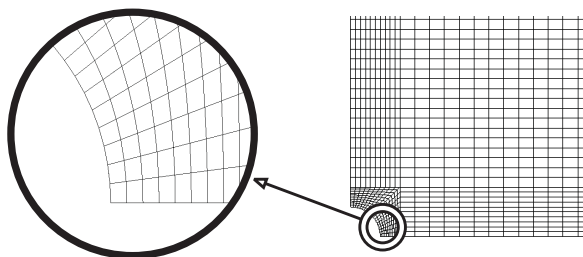
$$K_{tg}^* = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma}. \quad (6.3)$$

σ é a tensão nominal e σ_{\max} a tensão normal máxima na direcção Ox , junto ao furo no

plano Oyz . Na tabela 6.5 resumem-se os resultados obtidos. Os isovalores de tensão σ_x são ilustrados na figura 6.10. No caso de elementos finitos lineares, os valores apresentados resultam de um estudo de convergência de malha. Os estudos realizados com elementos quadráticos revelam algumas instabilidades na convergência, com oscilações da ordem dos 3%. Os valores apresentados na tabela 6.5 correspondem às melhores aproximações. Analisando os resultados da figura 6.10, pode constatar-se que a distribuição do campo de tensões é mais regular para os elementos lineares, especialmente no caso dos hexaedros de 8 nós. Notam-se ainda, no caso dos elementos quadráticos, algumas irregularidades nas distribuições de tensão em regiões onde esta deveria ser idêntica à tensão nominal.



(a)



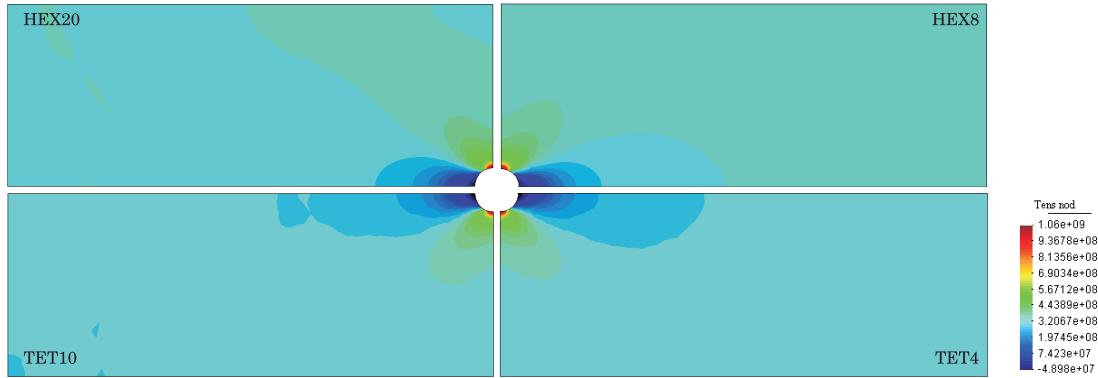
(b)

Figura 6.9: Representação esquemática da definição do problema de análise de concentração de tensões: (a) condições de fronteira e malha de elementos finitos e (b) refinamento local na região de gradientes mais acentuados de tensão.

No cômputo geral, nos ensaios anteriores verifica-se que as aproximações obtidas com os elementos quadráticos são globalmente melhores do que as obtidas com elementos lineares, mesmo com um número reduzido de graus de liberdade. Este facto é particularmente relevante nos tetraedros de 10 nós, conjugando a qualidade das aproximações com o facto de permitirem a geração automática de malha. Contudo, os elementos finitos lineares revelam uma maior coerência em termos de comportamento nos vários ensaios realizados, apresentando uma menor dependência relativamente ao tipo de problema. Consequentemente,

Tabela 6.5: Factores de concentração de tensões calculados numericamente.

	HEX8	TET4	HEX20	TET10
K_{tg}^*	3,048	3,011	3,060	3,007
Número de nós	6800	4755	11565	28319
Erro [%]	0,43	0,79	0,82	0,92

Figura 6.10: Representação comparativa dos isovalores de tensão σ_x para os diferentes elementos finitos utilizados.

mente, para os estudos realizados nas secções seguintes utilizam-se sempre os elementos finitos lineares: hexaedros de 8 nós e tetraedros de 4 nós.

6.3 Estudos de Desempenho

Nesta secção avalia-se o desempenho do algoritmo iterativo de resolução do sistema de equações, do tipo Gradiente Conjugado (GC), com os diferentes preconditionadores disponíveis. Procede-se também à resolução de um problema tipo recorrendo ao cálculo paralelo. O problema analisado consiste na flexão de uma viga encastrada. A malha estruturada utilizada é constituída por 54000 elementos hexaédricos e 175863 graus de liberdade.

6.3.1 Selecção de Precondicionadores

Tal como referido na Secção 5.2.4, a velocidade de convergência do método do gradiente conjugado depende do condicionamento do sistema de equações lineares [Barret 94]. Nesta secção comparam-se os tempos de resolução do sistema recorrendo aos diferentes preconditionadores disponíveis. Os ensaios foram realizados (i) sem preconditionamento (PC0), (ii) com o preconditionador de Jacobi (JAC), (iii) com preconditionamento de sobre-relaxação sucessiva simétrica (SSOR) e (iv) com a factorização incompleta de Cholesky de nível 0 (IC0). Os tempos totais de cálculo são os indicados na tabela 6.6. Indicam-se também os tempos relativos ao cálculo mais lento, assim como o número de iterações despendidas em cada caso.

Aparentemente, a melhor opção é o preconditionador SSOR. Efectivamente, é o que

Tabela 6.6: Indicadores de desempenho do algoritmo de resolução do sistema de equações lineares com e sem preconditionamento.

	PC0	JAC	SSOR	IC0
Tempo total de resolução [s]	280,9	89,6	55,3	167,9
Tempo relativo [%]	100	30,9	19,7	59,8
Número de iterações	840	256	164	129

apresenta tempos de resolução menores. No entanto, especialmente em cálculo paralelo, o melhor compromisso entre os vários parâmetros é obtido com o preconditionador IC0. Este facto pode explicar-se analisando os resultados da figura 6.11, onde se mostra a evolução dos resíduos¹ do processo iterativo para cada um dos preconditionadores. Observa-se a maior estabilidade do método do gradiente conjugado quando associado ao preconditionador IC0, em contraste com o seu funcionamento sem preconditionador. De facto, a utilização do preconditionador IC0 permite resolver o sistema com um número inferior de iterações. O tempo despendido relativamente aos mais rápidos prende-se o facto de o procedimento de factorização utilizado ser mais moroso. No entanto, os ganhos em problemas menos bem-condicionados são significativos, assim como em problemas de maiores dimensões.

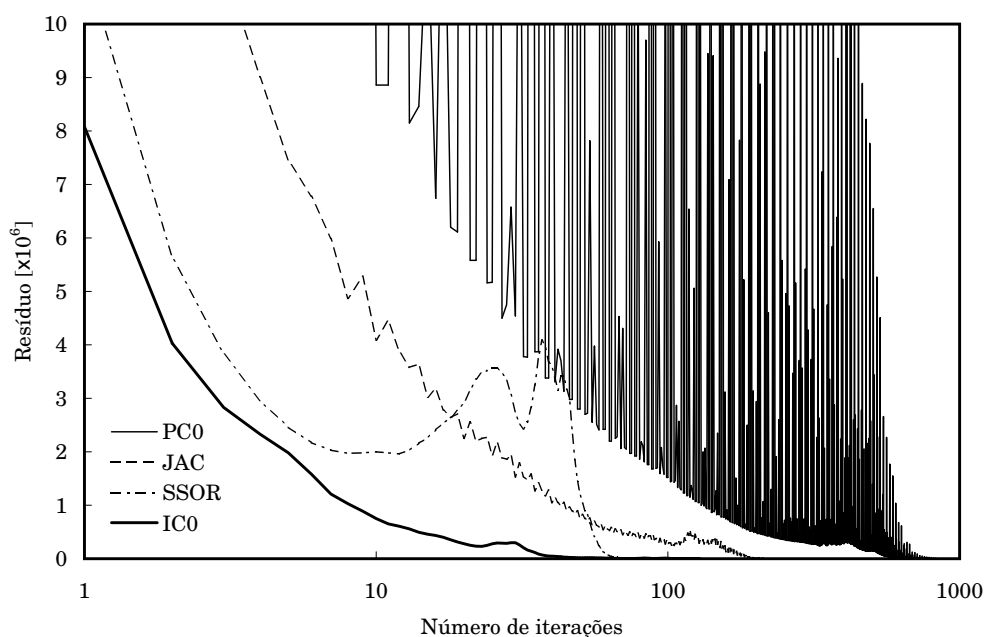


Figura 6.11: Evolução dos resíduos do processo iterativo de resolução do sistema de equações lineares, sem preconditionamento e com os preconditionadores utilizados.

¹O resíduo é a razão entre a norma do vector de resíduos do método do gradiente conjugado, $\|\mathbf{r}^{(k)}\|$, e a norma do vector de resíduos inicial, $\|\mathbf{r}^{(0)}\|$. Uma vez que a aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, o vector de resíduos inicial é o próprio vector de forças.

6.3.2 Cálculo Paralelo

Atendendo às conclusões obtidas na secção anterior, os resultados aqui apresentados são obtidos com a versão paralelizada do método do gradiente conjugado, associada ao preconditionador IC0. Pode verificar-se que nestas condições, mesmo em computação paralela, a evolução do processo iterativo é regular (ver figura 6.12). Os ensaios de cálculo paralelo foram executados no *cluster* Tetis², constituído por 13 PC, com processadores Pentium IV de 2,8 e 3,0 GHz e 2 GB de memória RAM, interligados por uma rede de 1 Gb/s. Nos ensaios realizados, foram utilizados oito processadores de 3,0 GHz e dois de 2,8 GHz. Um dos PC é utilizado como servidor do *cluster*. A gestão das comunicações entre computadores é suportada por um *switch* de 1 Gb/s (ver figura 5.9). Este sistema baseia-se no sistema operativo SuSE Linux 9.0, no MPICH 1.2.5-2, na distribuição Torque do Open PBS (*Portable Batch System*) e no sistema de gestão de filas de espera de processos MAUI.

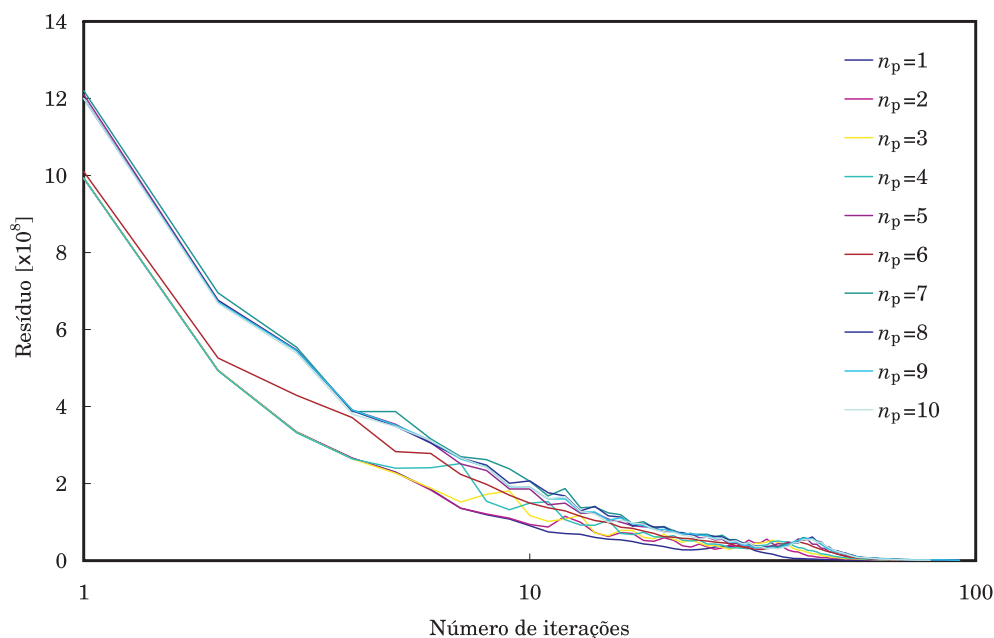


Figura 6.12: Evolução dos resíduos do processo iterativo de resolução, em paralelo, com diferentes números de processadores.

No gráfico da figura 6.13 mostra-se a evolução do tempo de cálculo com o número de processadores, n_p . t_p representa o tempo de cálculo total, *i.e.* despendido em todas as operações, quer em série quer em paralelo. Estas operações incluem as fases de leitura e condicionamento do problema, a construção do sistema de equações e a sua resolução. Não incluem, no entanto, as fases de pós-processamento. Pode constatar-se que t_p diminui com o aumento de n_p . Em particular, verifica-se que de 204 s necessários utilizando apenas um processador, o tempo de cálculo é reduzido para 31 s com a utilização de 10 processadores.

²Este *cluster* do tipo Beowulf é utilizado para cálculo científico de Estrutura Electrónica em Semicondutores e Metais e Estudos de Matéria Condensada com métodos de Monte Carlo pelo grupo de Física Teórica da Matéria Condensada do Departamento de Física da Universidade de Aveiro.

No entanto, esta tendência é cada vez menos significativa, *i.e.* sucessivos incrementos de n_p originam menores decrementos de t_p .

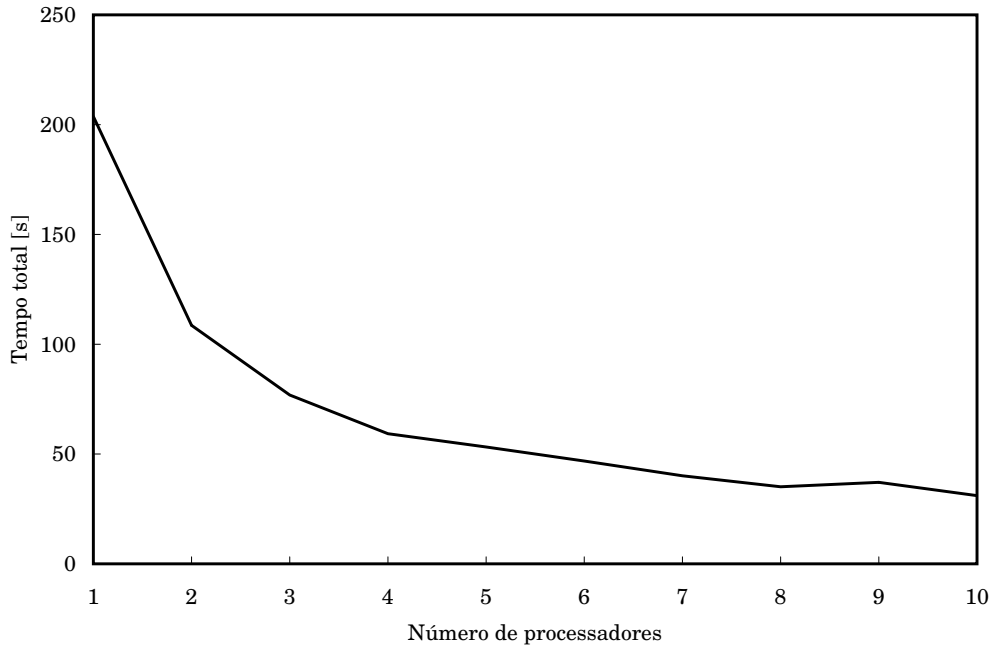


Figura 6.13: Variação do tempo total de resolução do problema em função do número de processadores.

Como foi já referido, a avaliação do desempenho de um algoritmo num sistema paralelo é frequentemente efectuada com base nos conceitos de *speed-up*, S_p , e de eficiência paralela, e_p (ver Secção 5.5.1). No gráfico da figura 6.14 mostra-se a variação de S_p com o número de processadores. Apresenta-se também a curva de comportamento linear, associada a um desempenho ideal do código paralelizado. Nesta situação particular, o tempo de cálculo despendido em cada um de k processadores seria k vezes menor do que o despendido no processamento em série, correspondendo a uma eficiência constante $e_p = 1$.

Com base nos resultados apresentados, pode verificar-se que os valores de S_p apresentam um comportamento sublinear. Por outro lado, os desvios de S_p relativamente à curva linear aumentam com o número de processadores. Este comportamento pode ser explicado pela conjugação dos seguintes factores: (i) a existência de operações executadas em série como, por exemplo, leitura de dados, o que limita o valor de *speed-up* [Amdahl 67], (ii) o aumento dos tempos de comunicação decorrentes das iterações efectuadas na resolução do sistema de equações lineares e (iii) o desequilíbrio no balanceamento da quantidade de trabalho numérico distribuída a cada processador. De facto, observa-se que o tempo de execução em série, representado na região inferior do gráfico da figura 6.15, apesar de sempre inferior a 10%, tem um peso relativo crescente à medida que o tempo total de cálculo diminui. Por outro lado, o domínio de cálculo é decomposto pelo programa Metis [Karypis 98], como se pode ver na figura 6.16. Este programa minimiza as fronteiras dos subdomínios relativamente aos volumes correspondentes (*i.e.* diminui o tempo de comunicação em relação ao tempo de cálculo efectivo) e distribui o trabalho numérico pelos

vários processadores de forma equilibrada.

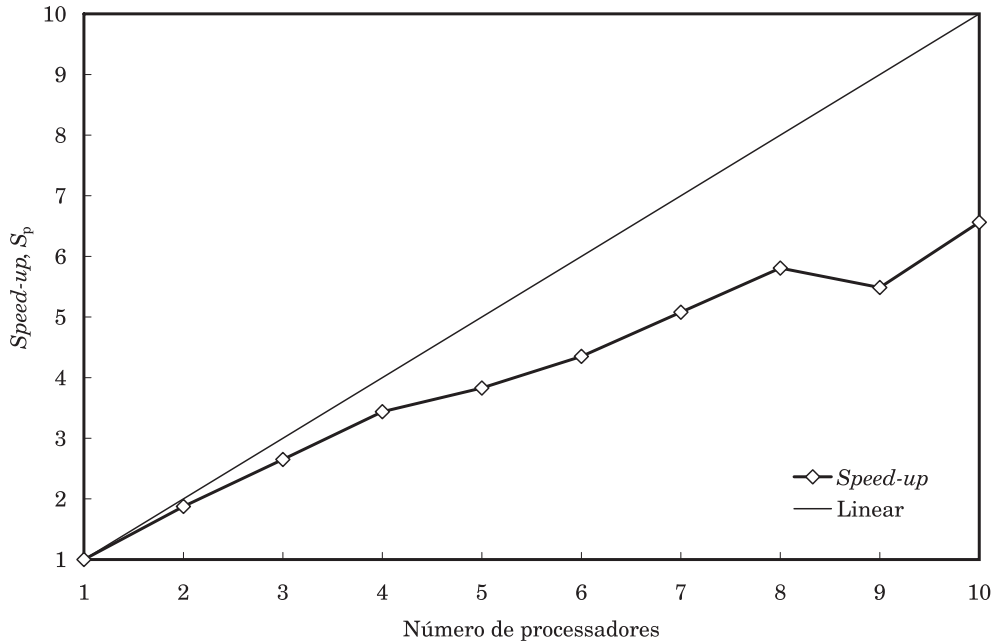


Figura 6.14: Evolução do *speed-up* com o número de processadores.

Na figura 6.17 está representada a evolução da eficiência paralela, e_p , com o número de processadores, n_p . Apresentam-se curvas de eficiência para o cálculo total, para a construção do sistema de equações e para a resolução do sistema. Para a totalidade de cálculo e para a resolução do sistema, e_p decresce com n_p . No caso da etapa de resolução do sistema, o mínimo obtido foi de 64% para 9 processadores, subindo para 70% com 10 processadores. Esta queda na eficiência deve-se ao facto de os dois últimos processadores serem mais lentos que os anteriores. A curva da eficiência do *solver* acaba por ser a mais determinante na forma da curva total de processamento. Esta apenas é deslocada para valores ligeiramente inferiores devido à existência da parte do processamento realizada em série, com peso crescente no tempo de cálculo (ver figura 6.15). Verifica-se ainda a reduzida variação da eficiência paralela da construção do sistema de equações com o número de processadores, mostrando ser completamente expansível. Tal se deve ao facto de cada matriz de rigidez ser construída e assemblada localmente. Neste caso, ao contrário da etapa de resolução do sistema, não é necessário trocar informação entre processadores. Assim, embora se verifique um decréscimo progressivo da eficiência paralela, a paralelização efectuada permite uma redução significativa do tempo total de cálculo do problema estudado.

6.4 Validação Numérica — Microescala

6.4.1 Estudos Preliminares

Nesta secção apresentam-se os estudos realizados com o objectivo de validar o procedimento de homogeneização por expansão assintótica (HEA): (i) análise de uma célula

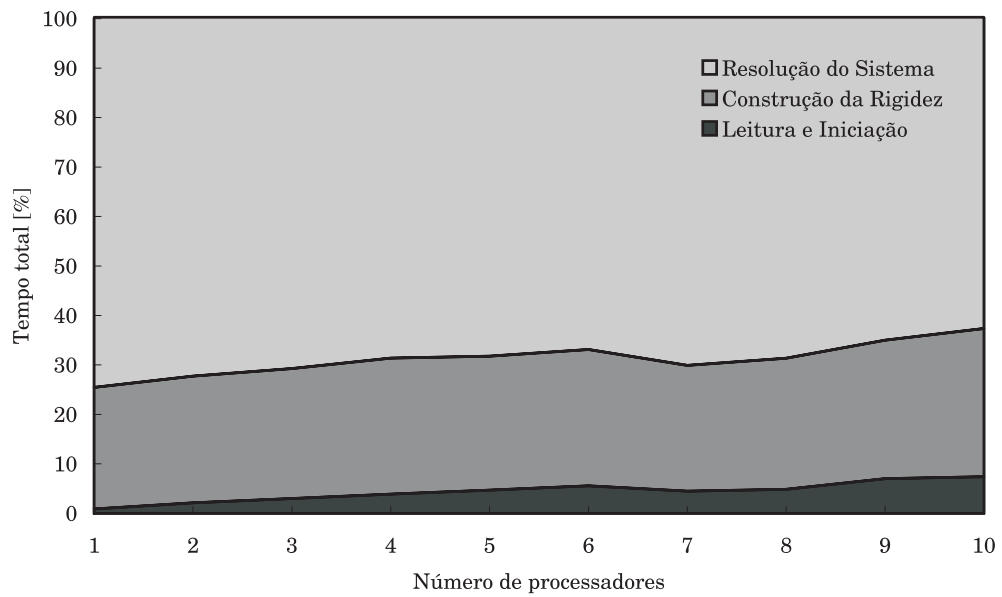


Figura 6.15: Evolução do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores.

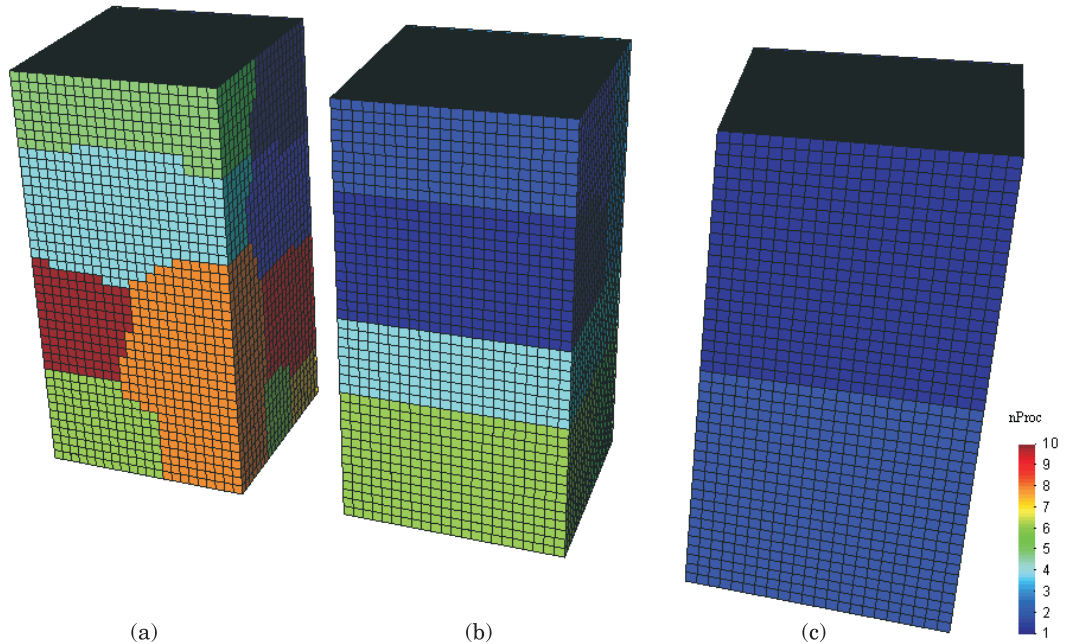


Figura 6.16: Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado. Exemplos para (a) 10, (b) 6 e (c) 2 processadores.

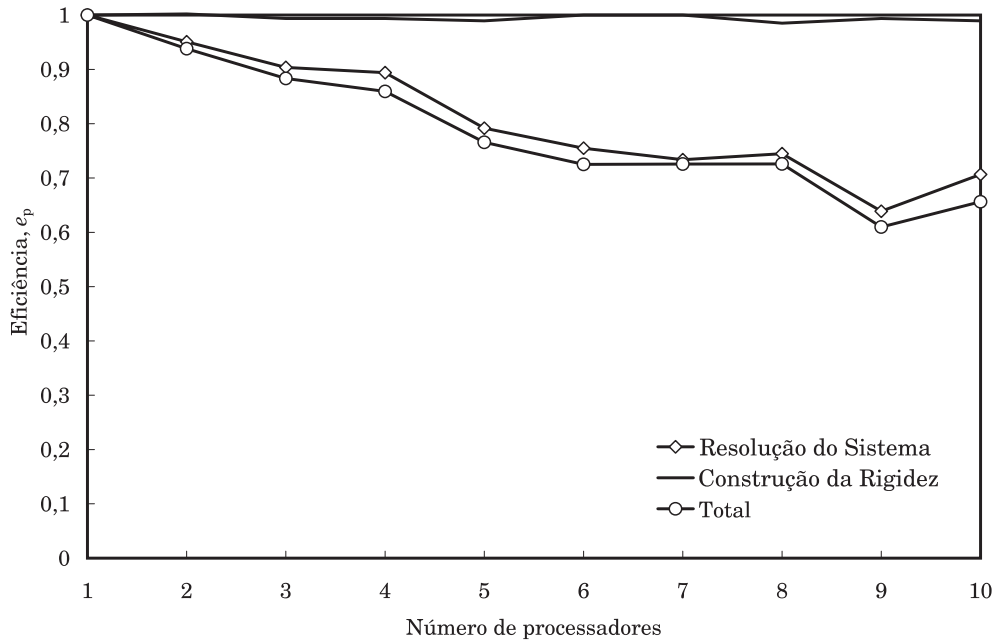


Figura 6.17: Evolução da eficiência com o número de processadores.

célula unitária representativa da microestrutura de um material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas e (ii) análise de uma célula representativa unitária de um material compósito em camadas. Na modelação numérica consideram-se as propriedades mecânicas elásticas indicadas na tabela 6.7.

Tabela 6.7: Propriedades mecânicas elásticas da matriz (m) e do reforço (r) consideradas nos estudos de validação.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade da matriz, E_m [GPa]	3,5
Coefficiente de Poisson da matriz, ν_m	0,35
Módulo de elasticidade do reforço, E_r [GPa]	72,0
Coefficiente de Poisson do reforço, ν_r	0,30

Utilizaram-se as malhas de elementos finitos isoparamétricos hexaédricos representadas na figura 6.18. A célula representativa unitária utilizada para o material compósito reforçado com fibras contínuas pode ter uma espessura mais reduzida, sendo as suas características essenciais definidas pela geometria da secção perpendicular ao eixo da fibra. As fracções volúmicas de reforço são $f_r = 0,35$ para o material compósito de fibras e $f_r = 0,20$ para o material compósito em camadas.

Para ilustrar os resultados obtidos com o procedimento de homogeneização, para o caso do material compósito com reforço de fibras contínuas, determinam-se os 6 modos próprios de deformação associados aos deslocamentos característicos da célula unitária (figura 6.19). Cada um destes modos próprios (ver Secção 5.2.5) corresponde a uma coluna do corrector

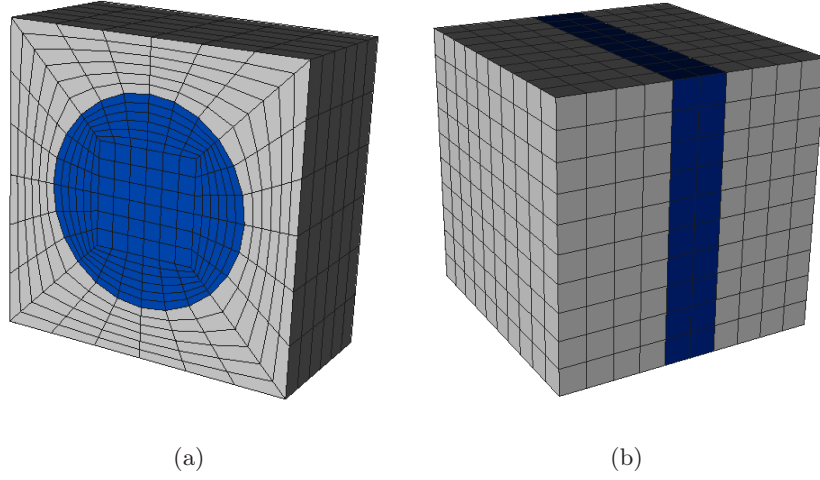


Figura 6.18: Malhas de elementos finitos utilizadas na modelação numérica (a) de um material compósito reforçado com fibras contínuas (1944 elementos) e (b) de um material compósito em camadas (1000 elementos).

do campo de deslocamentos χ . Os deslocamentos característicos são resultantes da imposição dos 6 vectores de força que constituem a matriz \mathbf{F}^D . Estes vectores são calculados por integração dos gradientes das propriedades elásticas dos materiais que constituem a célula representativa unitária segundo as 3 direcções principais da geometria (ver equação 5.12).

As matrizes de elasticidade homogeneizadas, \mathbf{D}^h , resultantes do processo de homogeneização, caracterizam um material ortotrópico, isto é, têm a forma genérica

$$\mathbf{D}^h = \begin{bmatrix} a & d & e & 0 & 0 & 0 \\ d & b & f & 0 & 0 & 0 \\ e & f & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \end{bmatrix}. \quad (6.4)$$

No entanto, os materiais aqui estudados correspondem a casos particulares de material ortotrópico, com duas direcções de propriedades idênticas. Assim, o material compósito de fibras distingue-se na direcção do eixo da fibra de reforço, onde a associação dos deslocamentos e rigidez de matriz e reforço se faz em paralelo, originando uma direcção de maior rigidez. No caso do material compósito em camadas o efeito é inverso, com uma direcção que se distingue por ter uma rigidez inferior devido à associação em série dos materiais constituintes (ver Secção 2.4).

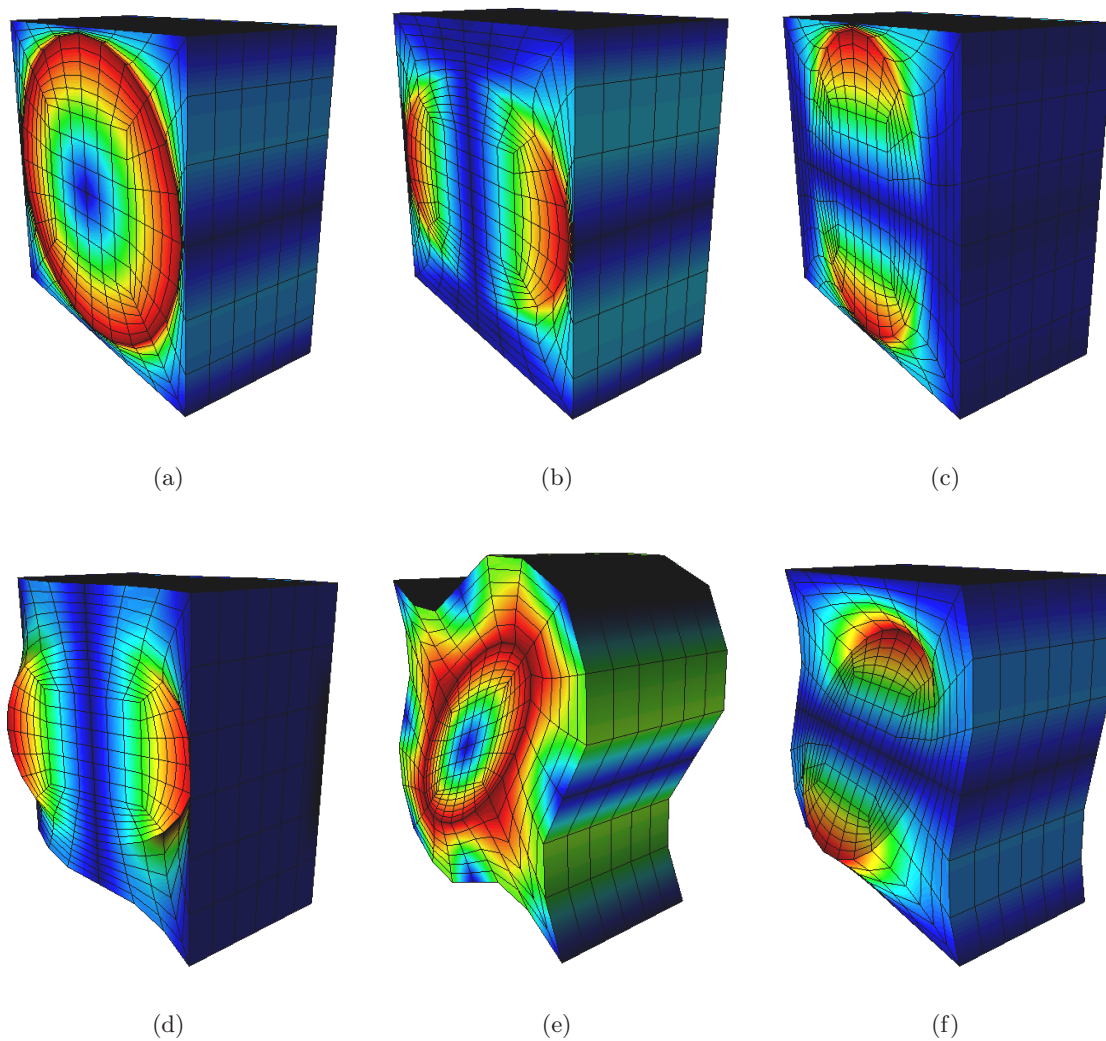


Figura 6.19: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária. Modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} , (c) χ_{33} e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} , (f) χ_{13} .

A inversão da matriz de elasticidade resulta na matriz de flexibilidade do material,

$$\mathbf{D}^{-1} = \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} & \frac{-\nu_{21}}{E_{22}} & \frac{-\nu_{31}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{22}} & \frac{-\nu_{32}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{13}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{23}}{E_{22}} & \frac{1}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} \end{bmatrix}. \quad (6.5)$$

De facto, as componentes S_{11} , S_{22} e S_{33} desta matriz correspondem aos inversos dos módulos de elasticidade do material em cada uma das direcções ortogonais definidas, E_{11} , E_{22} e E_{33} . Consequentemente, é possível determinar a rigidez dos materiais em cada uma das direcções de ortotropia. Estes valores podem ser comparados com valores calculados recorrendo a uma lei de misturas (ver Secção 2.4). Para o módulo de elasticidade, a aplicação da lei das misturas resulta nas duas equações [Callister 97]

$$E_{\max} = f_r E_r + (1 - f_r) E_m \quad (6.6)$$

e

$$E_{\min} = \frac{E_r E_m}{f_r E_m + (1 - f_r) E_r}, \quad (6.7)$$

em que f_r é a fracção volúmica de reforço e E_m e E_r são os módulos de elasticidade da matriz e do reforço, respectivamente. Os valores E_{\max} e E_{\min} definem a rigidez para uma associação em paralelo e em série, respectivamente. Na figura 6.20 comparam-se os resultados numéricos com os resultados analíticos. Em ambos os casos, pode verificar-se que os valores numéricos resultantes da homogeneização se encontram entre os limites definidos pelos valores analíticos. As diferenças verificadas traduzem o facto da HEA contemplar questões geométricas de distribuição dos materiais constituintes, assim como o efeito de Poisson. No caso do material compósito em camadas, o valor numérico de rigidez nas direcções de associação em paralelo coincide com o limite analítico superior. Este resultado justifica-se pelo facto do reforço ter continuidade com as células vizinhas em todas as direcções do plano. Assim, para além de ser mais rígido que a matriz, o reforço limita o efeito de Poisson ao provocar uma menor deformação transversal.

6.4.2 Malhas Não-Estruturadas

Nesta secção, realizam-se alguns ensaios comparativos com resultados encontrados na bibliografia, utilizando elementos hexaédricos isoparamétricos de 8 nós. Pretende-se aqui mostrar a viabilidade da utilização de malhas não-estruturadas de tetraedros para este tipo de cálculo [Chung 01, Pinho-da-Cruz 05].

Para o efeito, resolve-se numericamente o problema anteriormente proposto por Chung *et al.* [Chung 01], onde se analisam as propriedades mecânicas de uma célula representativa unitária da microestrutura de um material compósito de resina epóxida reforçado com fibras de vidro cilíndricas dispostas ortogonalmente (ver figura 6.21). Na modelação numérica consideram-se as propriedades elásticas indicadas na tabela 6.7.

No que diz respeito ao funcionamento do procedimento SLAVERY verifica-se que, no caso de malhas estruturadas, a associação de nós *master/slave* é trivial (ver Secção 5.4).

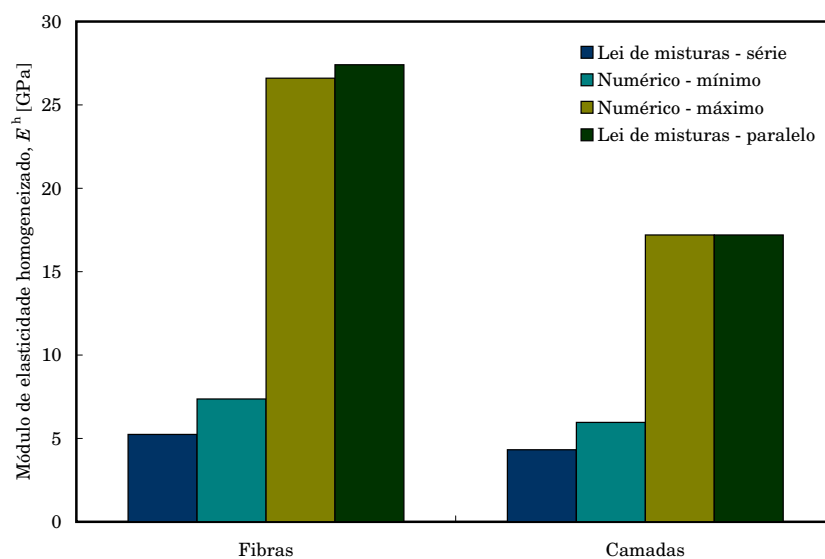


Figura 6.20: Comparação dos módulos de elasticidade calculados por HEA e pela lei de misturas, para um material compósito reforçado com fibras uniaxiais contínuas e um material compósito em camadas.

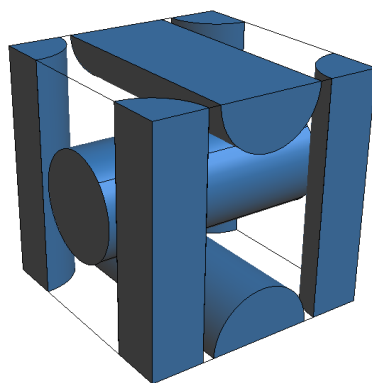


Figura 6.21: Geometria da célula representativa unitária do material compósito de fibras, proposta por Chung *et al.* [Chung 01].

Tal se deve ao facto de haver correspondência directa dos lugares geométricos de nós a associar em regiões de controlo opostas. No entanto, no caso de malhas não-estruturadas, o algoritmo implementado permite uma correcta associação de graus de liberdade, apesar de o procedimento envolver selecções aproximadas. Os maiores compromissos exigidos envolvem associações ocasionais de múltiplos graus de liberdade a um único grau de liberdade de controlo, bastando para isso que a malha na região *slave* seja localmente mais refinada que na região *master* correspondente. É também necessário impor limitações a graus de liberdade *master* que acabem por não ser associados a nenhum *slave*. Tal é feito de forma automática, no sentido de evitar que existam regiões das fronteiras da célula representativa unitária que não sejam sujeitas a condições de fronteira de periodicidade. Nestas regiões não-condicionadas tendem a ocorrer deformações locais excessivas, originando-se desvios nos resultados do processo de homogeneização.

Realiza-se um estudo de convergência considerando a variação relativa da norma euclidiana da matriz de elasticidade homogeneizada \mathbf{D}^h :

$$N_{\mathbf{D}^h} = \sqrt{\sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \left(D_{ij}^h\right)^2}, \quad (6.8)$$

em função do número de elementos, n_e . No entanto, a convergência da norma de uma matriz não é condição suficiente, apesar de necessária, para que se verifique a convergência simultânea de todas as suas componentes [Pinho-da-Cruz 05]. Deste modo, após um estudo de convergência baseado na norma $N_{\mathbf{D}^h}$ deve verificar-se o comportamento individual de todas as componentes da matriz. Neste estudo utilizam-se as malhas estruturadas de hexaedros de 8 nós e não-estruturadas de tetraedros de 4 nós ilustradas na figura 6.22.

Analisando em detalhe os resultados obtidos para este problema, verifica-se que a variação com o número de elementos da norma da matriz de elasticidade homogeneizada é representativa do comportamento individual das suas componentes. Assim, na figura 6.23 mostra-se a evolução da norma $N_{\mathbf{D}^h}$ com o número de elementos finitos. Relativamente aos elementos hexaédricos, os valores da norma de \mathbf{D}^h crescem assintoticamente para $N_{\mathbf{D}^h} \approx 42$ GPa. A evolução da norma de \mathbf{D}^h em malhas com elementos tetraédricos revela-se mais próxima de linear, constatando-se que os seus valores seguem uma tendência de aproximação aos valores obtidos com malhas de elementos hexaédricos. Para 9779 tetraedros obtém-se, para a norma de \mathbf{D}^h , um valor apenas 1,4% menor do que o máximo obtido com os elementos hexaédricos. Com base nestes resultados, para elementos hexaédricos, determina-se a variação relativa da norma $N_{\mathbf{D}^h}$ em termos de operações de refinamento de malha, ilustrada na figura 6.24. Verifica-se que para a malha de 16875 hexaedros a variação da norma de \mathbf{D}^h relativamente à malha anterior é inferior a 0,7%. Assim, considera-se a malha anterior, de 8640 hexaedros, como ideal em termos de garantia de convergência, à qual corresponde uma norma $N_{\mathbf{D}^h} = 41,5$ GPa. No caso dos elementos tetraédricos, a evolução relativa de $N_{\mathbf{D}^h}$ pode ver-se na figura 6.24, em que se considera como referência a solução obtida com elementos finitos hexaédricos. De facto, com este estudo pretende-se verificar que a utilização de malhas não-estruturadas de tetraedros permite obter resultados semelhantes aos obtidos com hexaedros. Para a malha com 9779 tetraedros, $N_{\mathbf{D}^h}$ difere menos de 0,7% da solução ideal. Pode assim concluir-se que a utilização de elementos tetraédricos permite atingir soluções com qualidade idêntica às dos elementos hexaédricos.

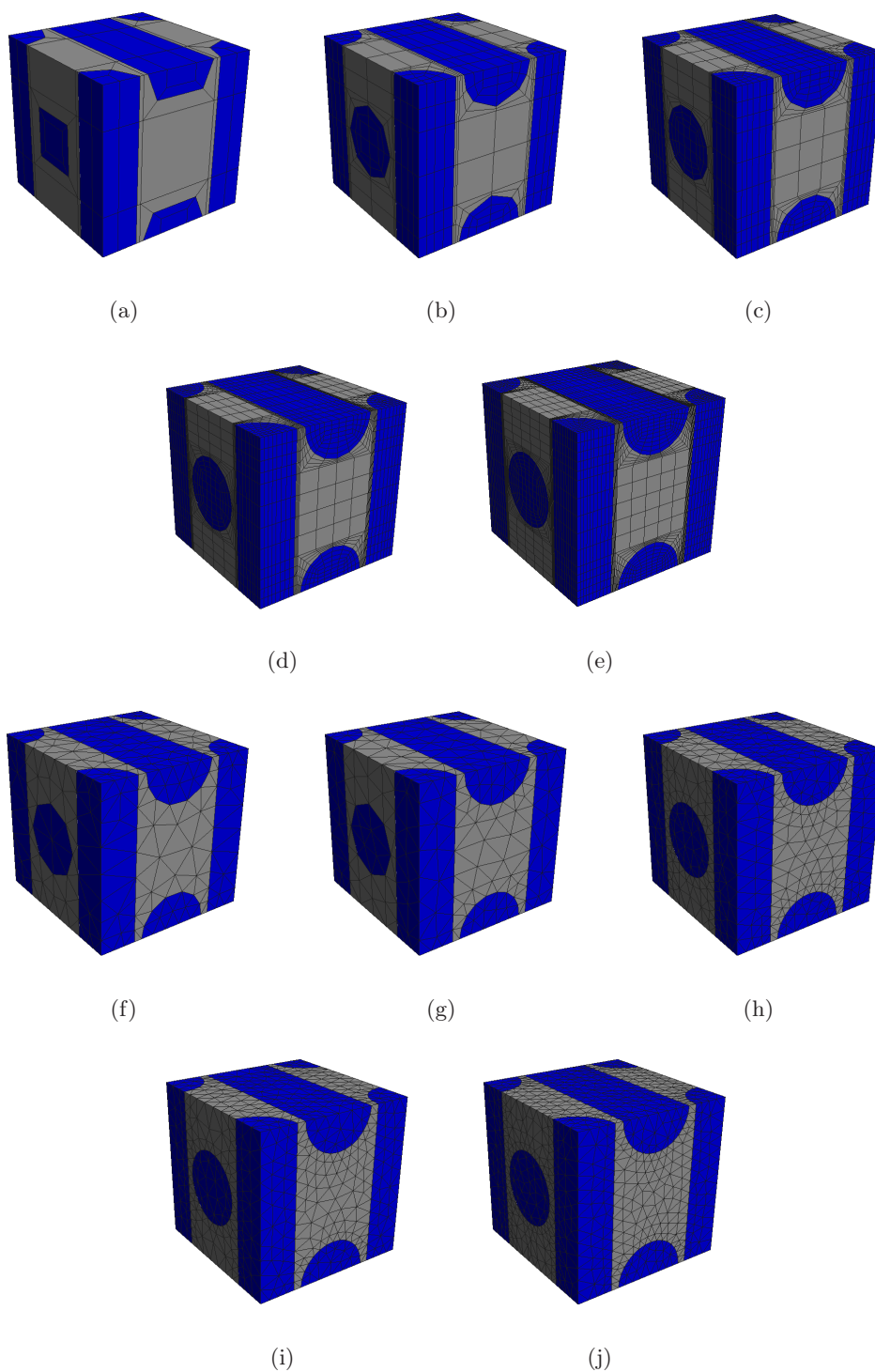


Figura 6.22: Malhas estruturadas de elementos finitos com (a) 135, (b) 1080, (c) 3645, (d) 8640 e (e) 16875 hexaedros, e não-estruturadas com (f) 1634, (g) 3245, (h) 5197, (i) 8350 e (j) 9779 tetraedros.

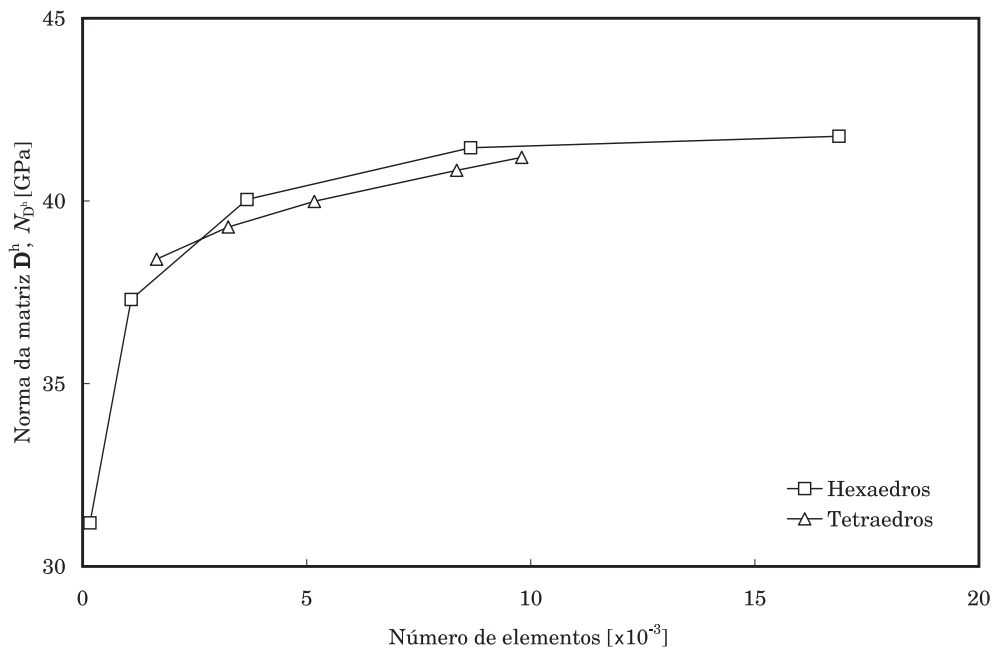


Figura 6.23: Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos n_e .

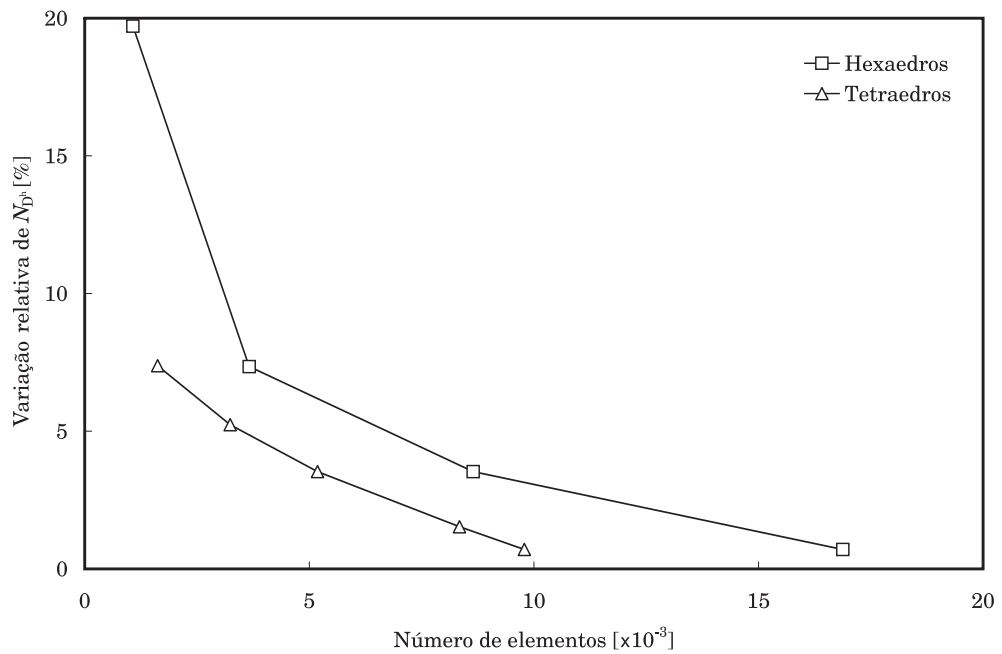


Figura 6.24: Variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos n_e .

Qualquer das soluções consideradas evidencia o carácter ortotrópico do comportamento mecânico associado à célula representativa unitária da microestrutura de um material compósito de resina epóxida reforçado com fibras de vidro (ver figura 6.21). As soluções obtidas para a matriz \mathbf{D}^h têm a seguinte forma genérica:

$$\mathbf{D}^h = \begin{bmatrix} a & b & b & 0 & 0 & 0 \\ b & a & b & 0 & 0 & 0 \\ b & b & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{bmatrix}. \quad (6.9)$$

Na tabela 6.8 apresentam-se os valores das componentes a , b e c de \mathbf{D}^h para as soluções consideradas. Mostram-se também os valores de referência obtidos por Chung *et al.* [Chung 01]. A discrepância entre a solução de Chung *et al.* [Chung 01] e os resultados aqui apresentados pode ter origem na malha de elementos finitos. De facto, os resultados de Chung *et al.* [Chung 01] são obtidos com uma malha com apenas 1472 elementos hexaédricos. Verifica-se que esta solução se encontra entre os valores obtidos no estudo de convergência para 1080 e 3645 elementos hexaédricos. Tal confirma que esta diferença pode ter origem no refinamento da malha. As soluções apresentadas revelam ainda que a célula representativa unitária considerada corresponde a um material cúbico. Este tipo de material é um caso particular de material ortotrópico que apresenta a particularidade das suas propriedades mecânicas serem as mesmas segundo as três direcções de ortotropia [Dowling 99] (ver Secção 2.3).

Tabela 6.8: Valores das componentes D_{ij}^h para as soluções consideradas e solução de referência.

	a [GPa]	b [GPa]	c [GPa]
Elementos Hexaédricos	22,2	5,8	4,1
Elementos Tetraédricos	22,2	5,7	4,1
Chung <i>et al.</i> [Chung 01]	21,1	5,3	3,4

Note-se ainda que, no contexto da homogeneização por expansão assintótica, as propriedades homogeneizadas aqui apresentadas são obtidas recorrendo ao corrector do campo de deslocamentos χ (ver equações 5.12 e 5.14). Os deslocamentos característicos definidos pelo corrector fornecem uma medida da heterogeneidade da microestrutura do material compósito [Chung 99b]. Nas figuras 6.25 e 6.26 estão representados os 6 modos próprios de deformação χ_{kl} , associados aos deslocamentos característicos da célula representativa unitária para as malhas de elementos finitos hexaédricos e tetraédricos, respectivamente. Os deslocamentos característicos definidos pelas colunas de χ são o resultado de um sistema de equações em que os vectores de força correspondem às colunas da matriz \mathbf{F}^D (ver equação 5.12). Estes vectores são ilustrados na figura 6.27. Constata-se que as forças surgem nas interfaces matriz-reforço, sendo a sua intensidade definida pela magnitude da diferença das propriedades elásticas dos materiais constituintes. É importante verificar que os deslocamentos característicos da célula representativa unitária são idênticos para os

dois tipos de elementos finitos utilizados. Adicionalmente, o facto de as propriedades elásticas homogeneizadas obtidas com as diferentes malhas convergirem para valores idênticos significa que o procedimento de homogeneização por expansão assintótica conduz a correctores χ representativos das mesmas heterogeneidades, apesar de discretizadas de forma diferente. Por sua vez, a periodicidade na microescala (Y-periodicidade) dos deslocamentos característicos da célula representativa unitária é ilustrada, para o caso particular do modo de corte χ_{23} , nas figuras 6.28(a) e 6.28(b), com 8 CRU com malhas de elementos finitos hexaédricos e tetraédricos, respectivamente. Mais uma vez, verifica-se haver coerência entre os resultados obtidos com malhas de elementos finitos estruturadas e não-estruturadas.

6.5 Efeito da Fracção Volúmica de Reforço

Face às conclusões retiradas na secção anterior, recorre-se à utilização de malhas de elementos finitos não-estruturadas para estudar o comportamento de células representativas unitárias com geometrias complexas. Neste ponto, analisa-se a influência da fracção volúmica de reforço nas componentes da matriz de elasticidade homogeneizada \mathbf{D}^h em materiais compósitos de matriz metálica de AlSiCp. Determina-se também o nível de aproximação a um comportamento isotrópico dos valores médios de \mathbf{D}^h , obtidos com 5 células representativas com iguais fracções volúmicas de reforço.

Geram-se aleatoriamente 5 CRU cúbicas para fracções volúmicas de reforço entre 10 e 50%. As geometrias destas células estão representadas na figura 6.29. As propriedades elásticas da matriz (m) e do reforço (r) são as indicadas na tabela 6.9. Efectuam-se simulações numéricas e procede-se, de forma análoga ao efectuado na secção anterior, a um estudo de convergência da matriz \mathbf{D}^h associada a cada uma das CRU consideradas. Na figura 6.30 mostra-se a evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos. A análise é apresentada para uma única CRU de cada fracção volúmica, observando-se comportamentos semelhantes para as restantes fracções volúmicas. Analisando os resultados da figura 6.30 pode observar-se que os valores da norma $N_{\mathbf{D}^h}$ não variam significativamente com o número de elementos utilizados. A excepção a esta tendência são os resultados relativos à fracção volúmica de 40%, onde se observa um aumento de aproximadamente 4,8% no valor de $N_{\mathbf{D}^h}$ para a malha de 10841 elementos. A análise da variação das componentes das matrizes obtidas é coerente com este facto. Na figura 6.31 analisam-se as variações relativas da norma da matriz \mathbf{D}^h com o refinamento da malha. Estas variações são sempre inferiores a 0,5%. Mais uma vez, a excepção surge no caso da célula representativa unitária com 40% de fracção volúmica de reforço, em que, devido à instabilidade já referida, se atinge um valor máximo de 4,8%. Nas figuras 6.32 a 6.34 estão representadas as componentes das matrizes \mathbf{D}^h , após o estudo de convergência, para as células representativas unitárias geradas para cada fracção volúmica de reforço (ver figura 6.29). Verifica-se que as componentes mais significativas das matrizes \mathbf{D}^h são as associadas ao comportamento ortotrópico do material (ver equação 6.9). Em rigor, as restantes componentes são entre 3 a 5 ordens de grandeza inferiores. No entanto, a contribuição destas componentes de ordem inferior não influencia de modo significativo o comportamento elástico do material. Neste contexto, os resultados apresentados nestas figuras indicam que a resposta macroscópica de material homogeneizado é essencialmente do tipo ortotrópico. Tal conclusão é coerente com as condições de periodicidade impostas durante o procedimento de homogeneização.

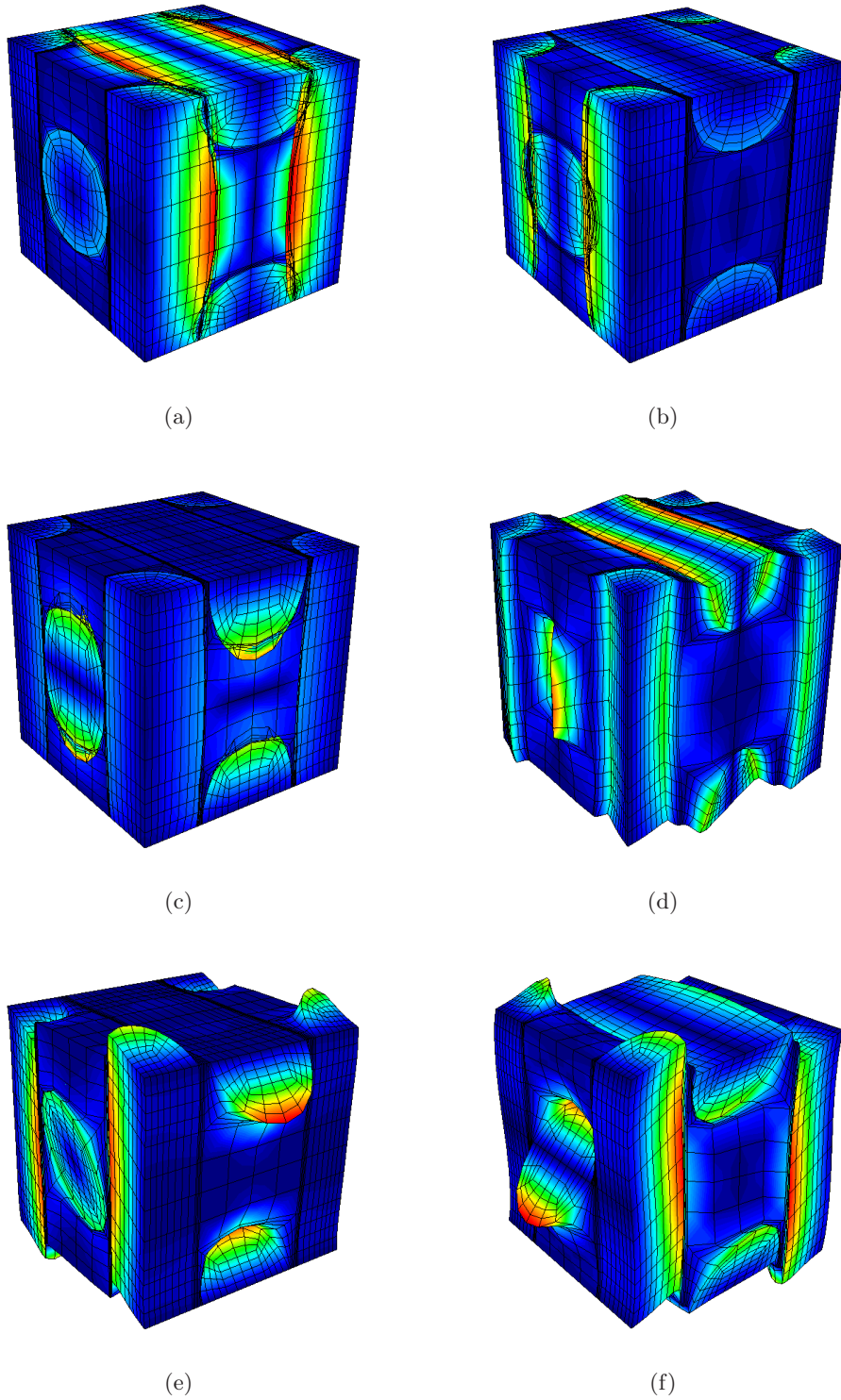


Figura 6.25: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária com elementos finitos hexaédricos. Modos próprios normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} , (c) χ_{33} e de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} , (f) χ_{13} .

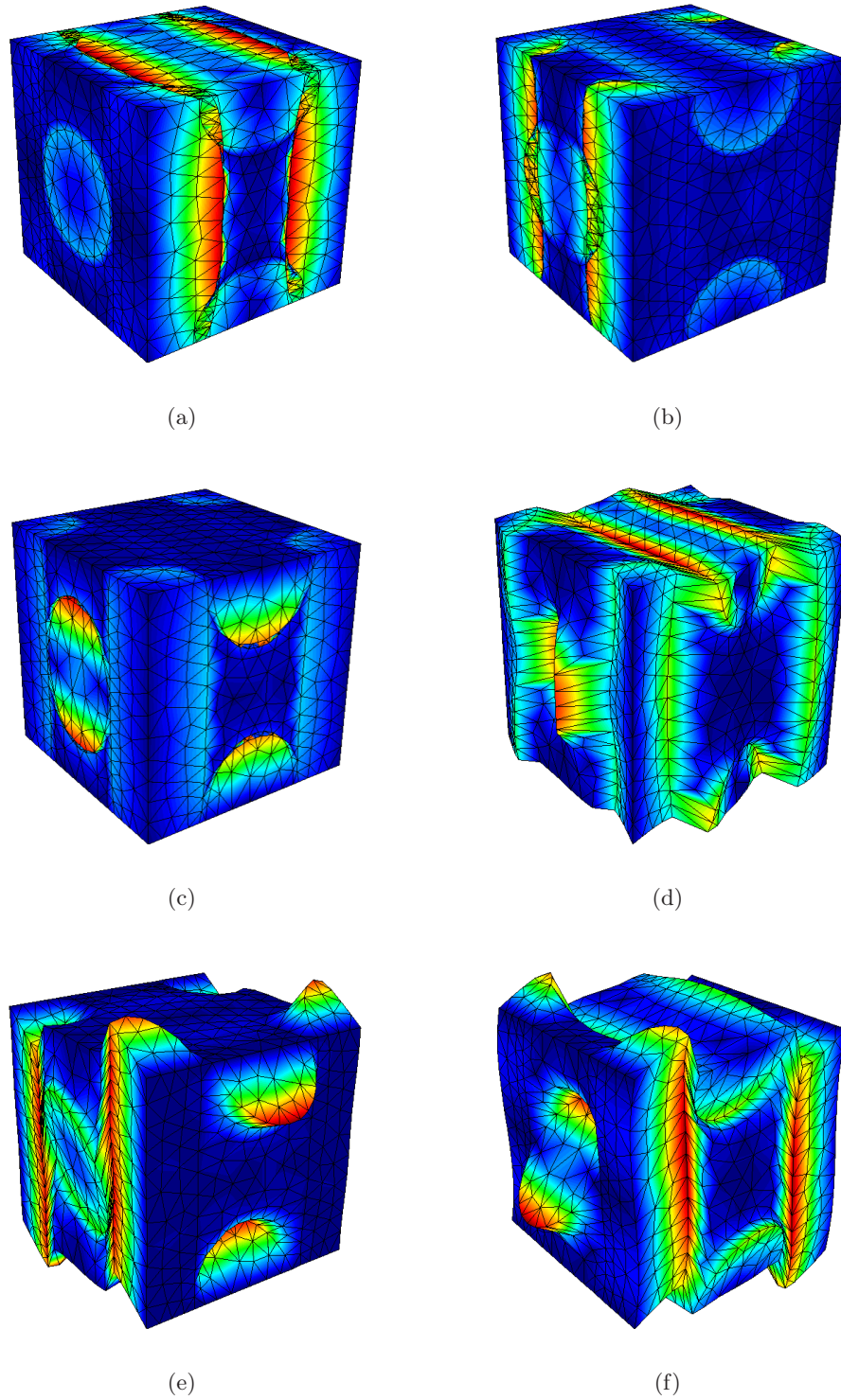


Figura 6.26: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária com elementos finitos tetraédricos. Modos próprios normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} , (c) χ_{33} e de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} , (f) χ_{13} .

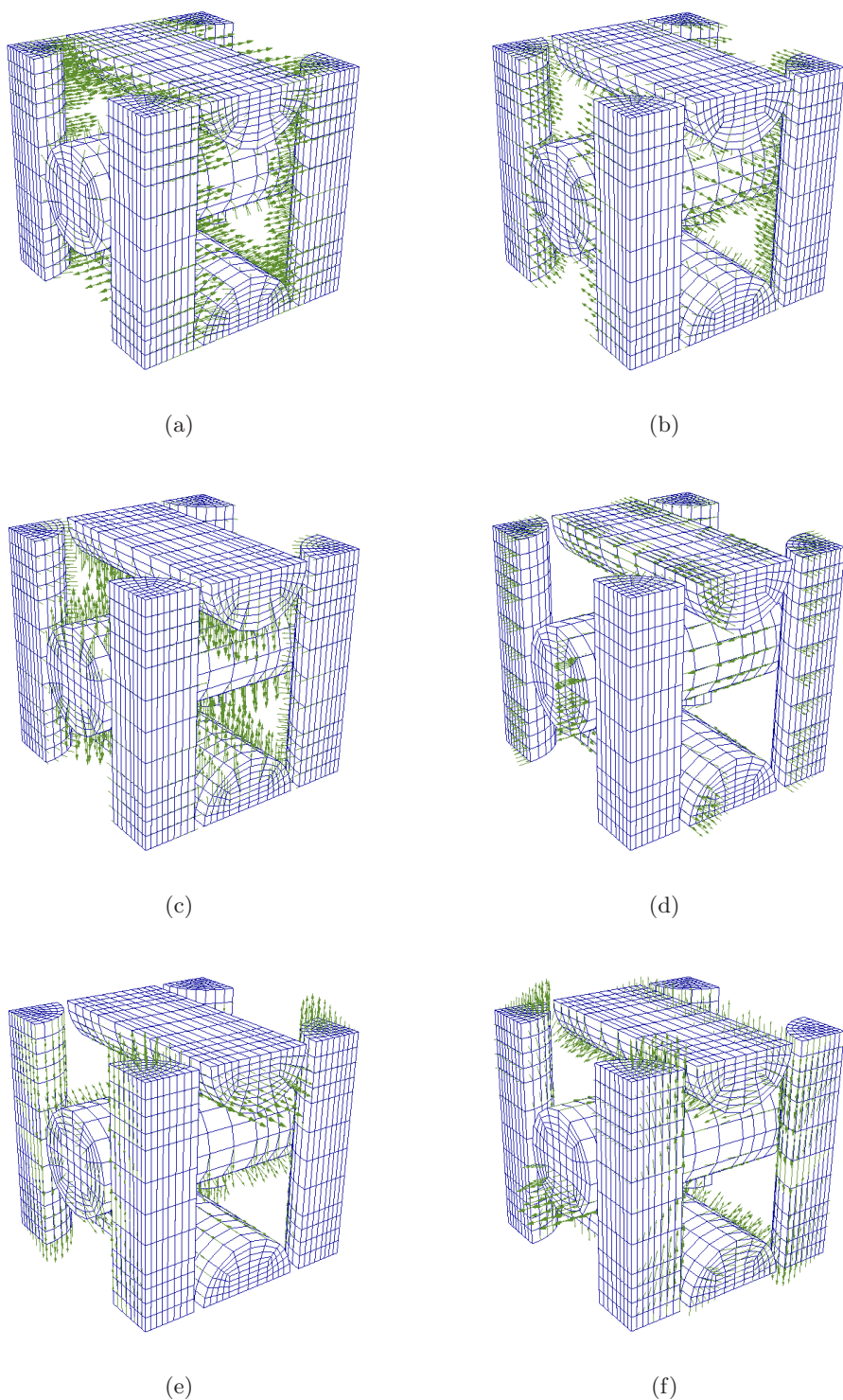


Figura 6.27: Vectores das solicitações características da célula representativa unitária com elementos finitos hexaédricos. Modos próprios normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D , (c) \mathbf{F}_{33}^D e de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D , (f) \mathbf{F}_{13}^D .

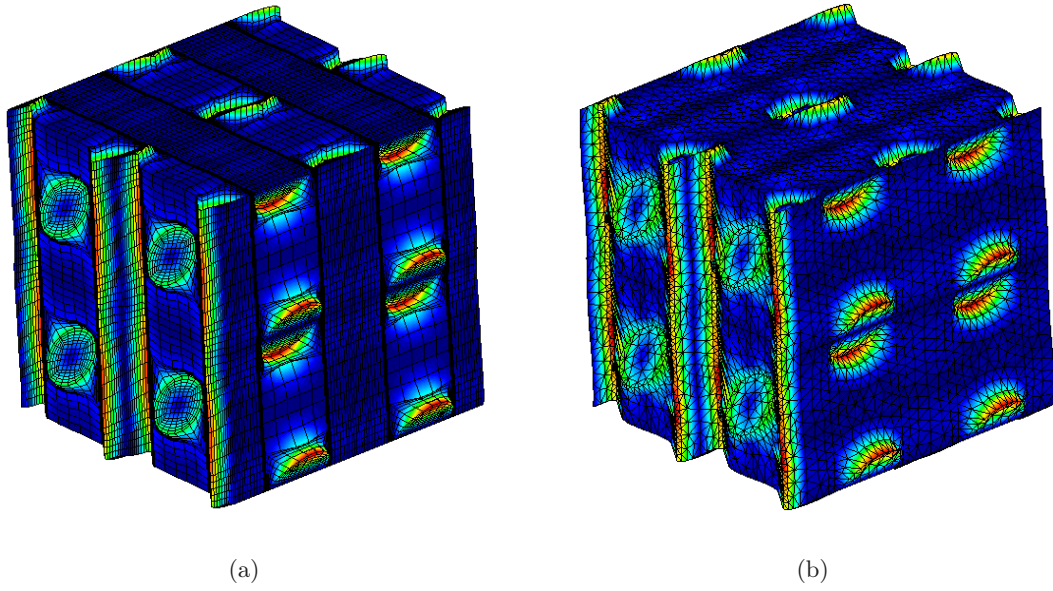
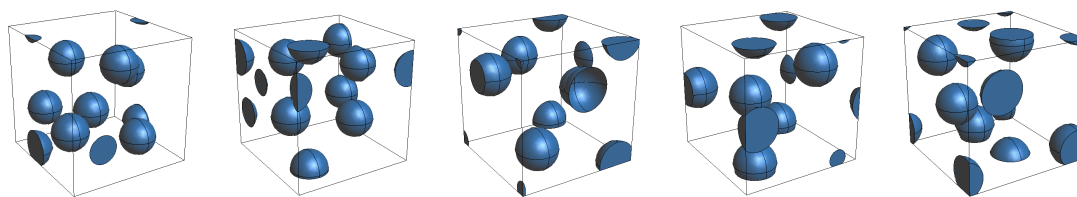


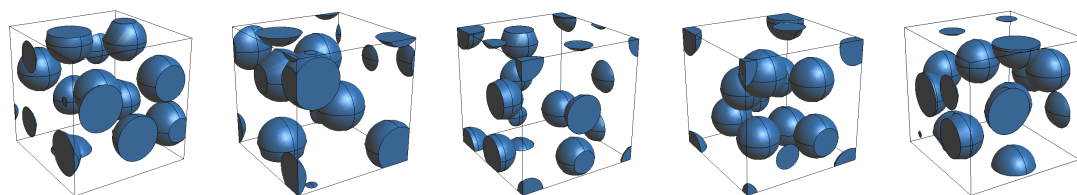
Figura 6.28: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos. Ilustração do modo de corte χ_{23} utilizando 8 células representativas unitárias com malha de (a) hexaedros e (b) tetraedros.

Tabela 6.9: Propriedades mecânicas elásticas consideradas para o estudo do efeito da variação de fracção volúmica de reforço.

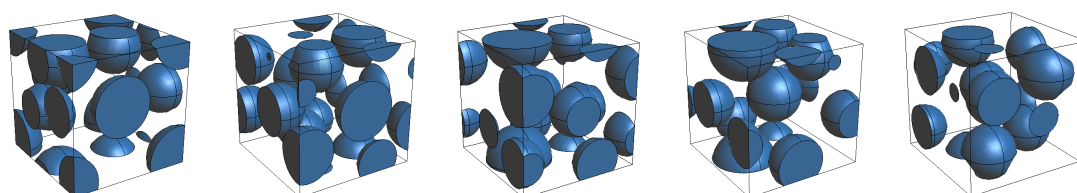
Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade da matriz, E_m [GPa]	70,0
Coefficiente de Poisson da matriz, ν_m	0,32
Módulo de elasticidade do reforço, E_r [GPa]	410,0
Coefficiente de Poisson do reforço, ν_r	0,24



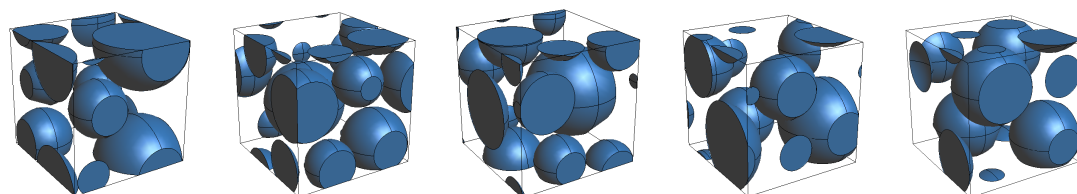
(a)



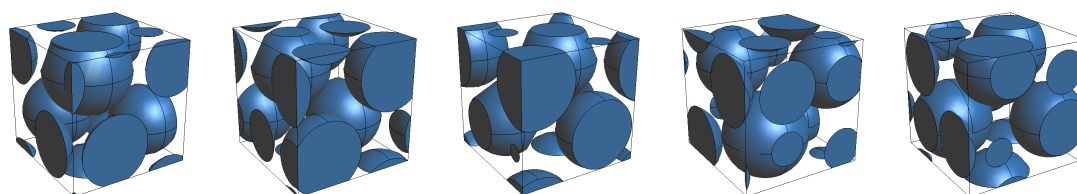
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 6.29: Geometrias de células representativas unitárias geradas automaticamente com distribuições aleatórias de partículas esféricas. Frações volúmicas de reforço de (a) 10%, (b) 20%, (c) 30%, (d) 40% e (e) 50%.

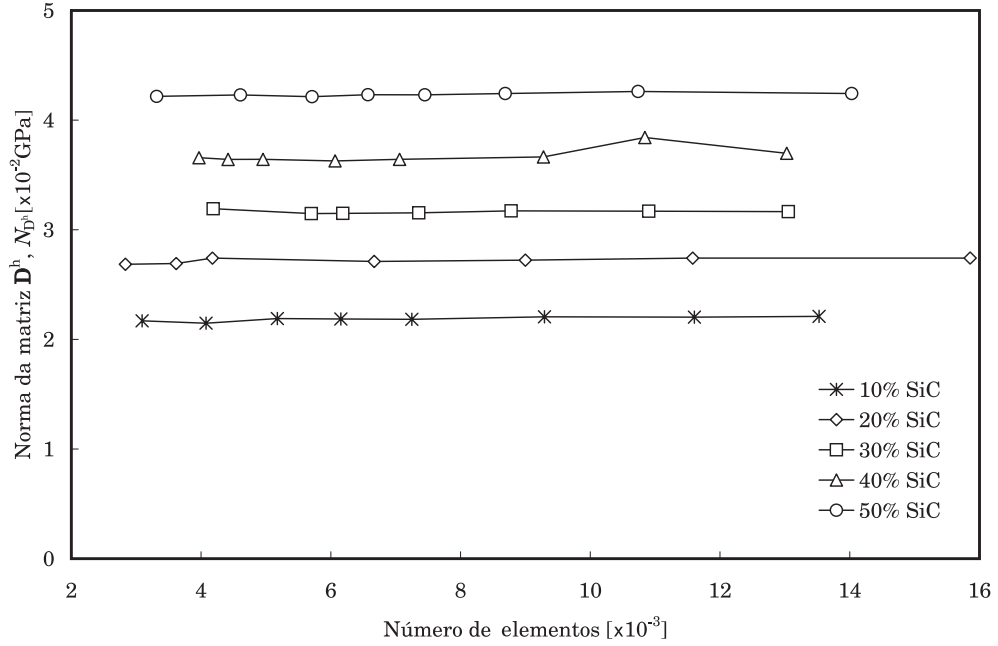


Figura 6.30: Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos tetraédricos n_e , para células representativas unitárias de AlSiC_p .

De modo a ilustrar o efeito da variação da fracção volúmica de reforço, na figura 6.35 representam-se as componentes das várias matrizes \mathbf{D}^h calculadas. Pode observar-se que as componentes homónimas, *i.e.* com os mesmos índices, crescem proporcionalmente, embora não directamente, à fracção volúmica de reforço. Por outro lado, para a generalidade das matrizes \mathbf{D}^h , as componentes D_{11}^h , D_{22}^h e D_{33}^h diferem entre si. Tal exclui a possibilidade das matrizes corresponderem a um comportamento isotrópico [Dowling 99]. No entanto, refira-se que a média aritmética de matrizes \mathbf{D}^h associadas a um maior número de células unitárias, geradas aleatoriamente com mesma fracção volúmica de reforço, conduz a resultados que se aproximam do comportamento isotrópico. As componentes médias de \mathbf{D}^h encontram-se representadas de forma esquemática na figura 6.36, para as várias fracções volúmicas de reforço. Verifica-se que, para 10 e 20% de fracção volúmica de reforço, estas componentes parecem corresponder a materiais cúbicos. Este tipo de material apresenta as mesmas propriedades mecânicas segundo as três direcções de ortotropia e é caracterizado por possuir três valores independentes na matriz constitutiva. Para 30, 40 e 50% de fracção volúmica de reforço constata-se que as componentes D_{11}^h , D_{22}^h e D_{33}^h são diferentes, correspondendo a um material ortotrópico que, no entanto, não é cúbico.

Com base nestes resultados pode determinar-se o nível de isotropia associado aos valores médios de \mathbf{D}^h obtidos com 5 células representativas unitárias para 10 e 20% de fracção volúmica de reforço, que apresentam um comportamento aparentemente cúbico. De facto, embora um material cúbico seja caracterizado por três valores independentes da matriz constitutiva (E , ν e G), um material isotrópico, ao apresentar as mesmas propriedades mecânicas segundo qualquer direcção, é definido por apenas dois valores independentes (E e ν). Um material isotrópico é assim um caso particular de material cúbico que apre-

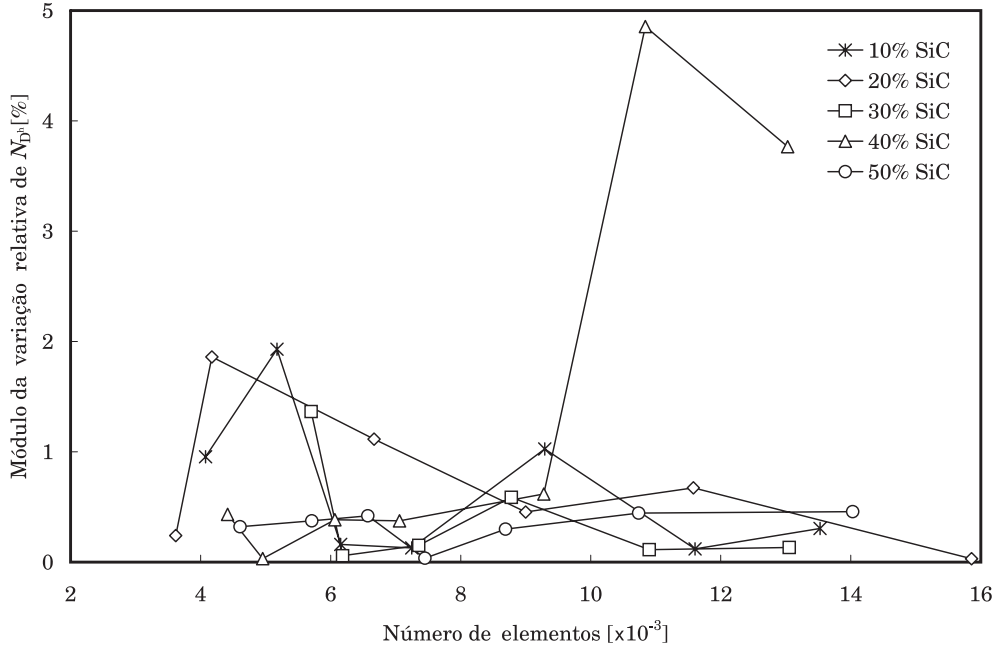
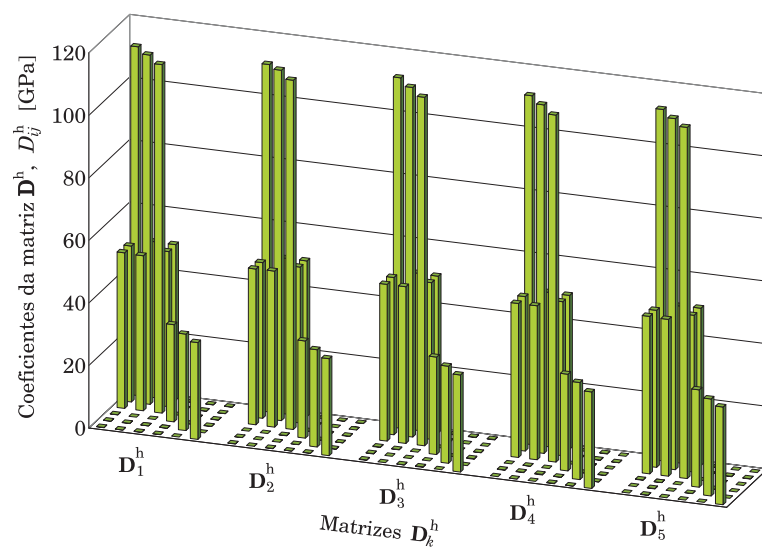


Figura 6.31: Variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos tetraédricos n_e , para células representativas unitárias de AlSiC_p .

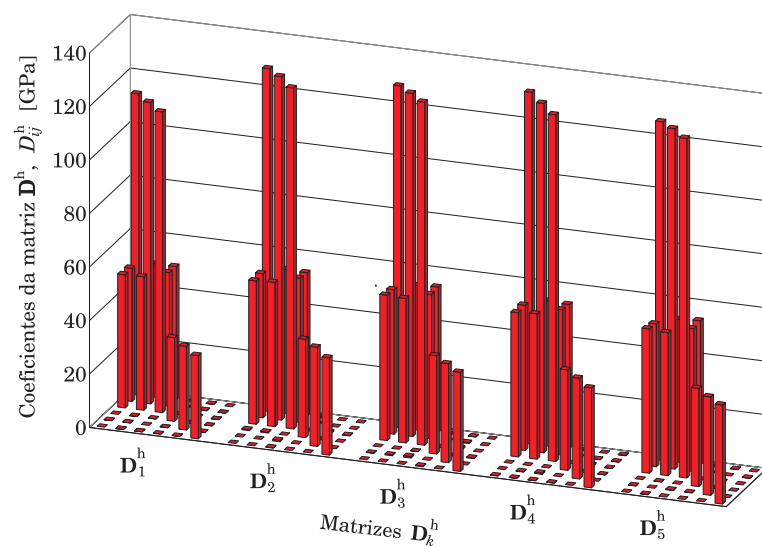
senda independência do referencial, traduzida na dependência do coeficiente de elasticidade transversal relativamente ao módulo de elasticidade e ao coeficiente de Poisson. De facto, a inversa da matriz constitutiva \mathbf{D} de um material isotrópico é

$$\mathbf{D}^{-1} = \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix}. \quad (6.10)$$

\mathbf{S} é a matriz de flexibilidade definida na equação 2.21. Deste modo, a matriz constitutiva não-singular de um material isotrópico ou cúbico é semelhante à apresentada na expressão 6.9 [Dowling 99]. Estes dois tipos de material apenas diferem no facto de $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$ não se verificar para um material cúbico. Deste modo, determinando as inversas das matrizes constitutivas médias para as fracções volúmicas de 10 e 20% é possível definir univocamente os valores E , ν e G para estes materiais. O carácter de isotropia do comportamento pode ser determinado calculando a diferença entre o valor numérico do módulo de corte G e o correspondente a um material isotrópico. Invertendo as matrizes constitutivas médias para 10 e 20% de fracção volúmica de reforço, os valores de G diferem apenas 0,53 e 0,94% dos valores teóricos, respectivamente. Pode então concluir-se que, embora as matrizes obtidas para as várias CRU correspondam a comportamentos ortotrópicos, as suas médias aritméticas apresentam um carácter isotrópico para 10 e 20% de fracção volúmica de reforço e ortotrópico para 30, 40 e 50% de fracção volúmica de reforço. No entanto, verifica-se que a média aritmética de um maior número de células representativas

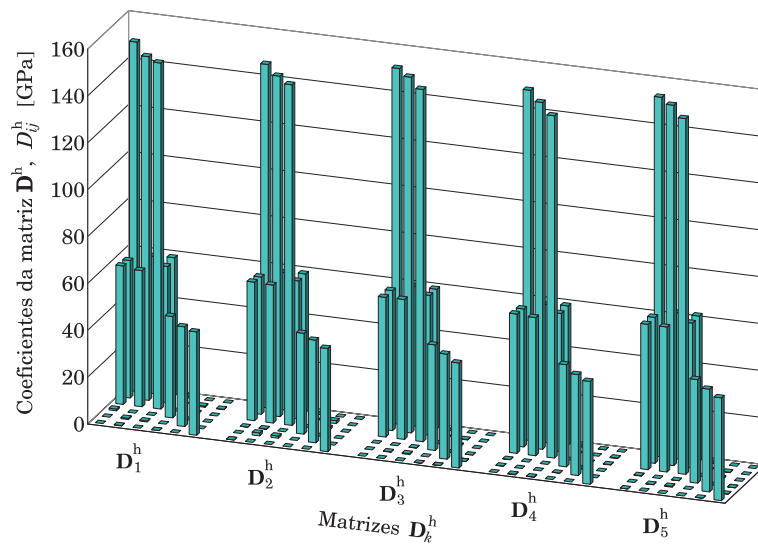


(a)

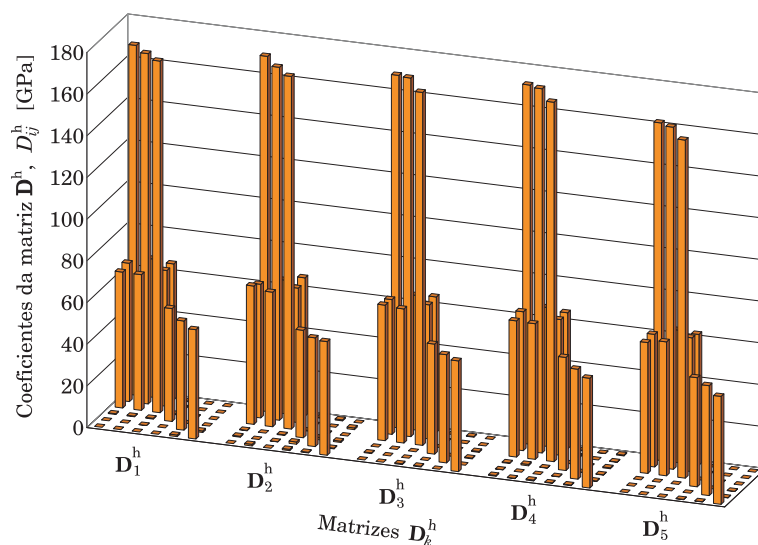


(b)

Figura 6.32: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h para as células representativas unitárias com (a) 10% e (b) 20% de fracção volúmica de reforço.



(a)



(b)

Figura 6.33: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h para as células representativas unitárias com (a) 30% e (b) 40% de fracção volúmica de reforço.

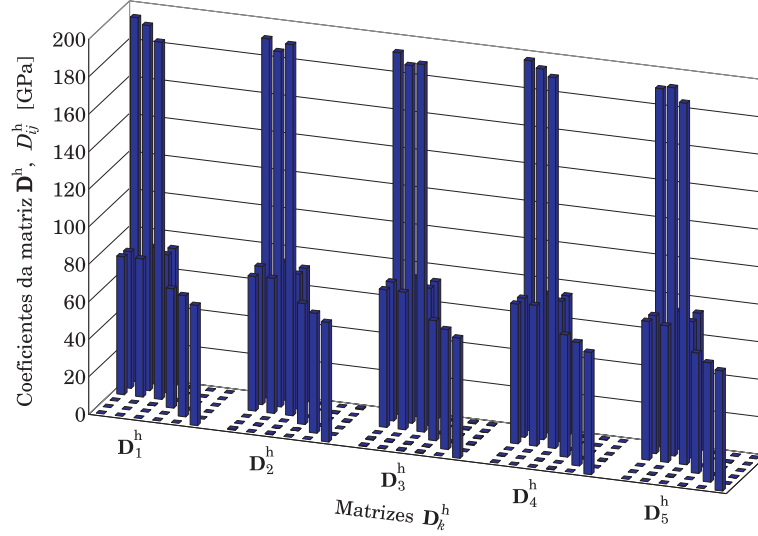


Figura 6.34: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h para as células representativas unitárias com 50% de fracção volúmica de reforço.

unitárias geradas aleatoriamente conduz a resultados que se aproximam do comportamento isotrópico.

Outra metodologia que permite analisar o comportamento de materiais compósitos consiste na lei das misturas, referida na Secção 2.4. Tomando em consideração o módulo de elasticidade, a aplicação desta lei a materiais compósitos reforçados com partículas resulta nas equações 6.6 e 6.7, que definem as curvas-limite superior, E_s^h , e inferior, E_i^h , para a variação do módulo de elasticidade homogeneizado, E^h . Estas equações correspondem, em termos de deslocamentos e rigidez, à aplicação da lei das misturas a associações de dois materiais em paralelo (E_s^h) e em série (E_i^h), respectivamente. Atenda-se ainda ao facto de a equação 6.7 se obter a partir da equação 3.49 quando se anulam os gradientes dos modos característicos de deslocamento χ_{kl} . Consequentemente, a equação 3.49 pode ser vista como uma generalização da lei das misturas em que, com base nos dos gradientes de χ_{kl} , se considera o efeito da interacção das diferentes fases que definem a morfologia heterogénea da microestrutura no comportamento médio do material compósito. Na figura 6.37 são apresentados os valores do módulo de elasticidade obtidos a partir das matrizes constitutivas médias para as fracções volúmicas de 10 e 20% e o valor máximo de E_{11} , E_{22} e E_{33} , das matrizes constitutivas médias para as restantes fracções volúmicas. Como se pode observar, os valores calculados situam-se entre os limites definidos pela lei das misturas.

6.6 Análise Macroestrutural

No cálculo multiescala, a definição das propriedades homogeneizadas do material da macroescala resume-se à utilização da matriz \mathbf{D}^h obtida no cálculo da microescala. Nesta secção analisa-se o comportamento mecânico macroestrutural de um bloco de material compósito de matriz metálica de AlSiCp. O bloco de dimensões $100 \times 100 \times 200$ [mm³] encontra-se fixo

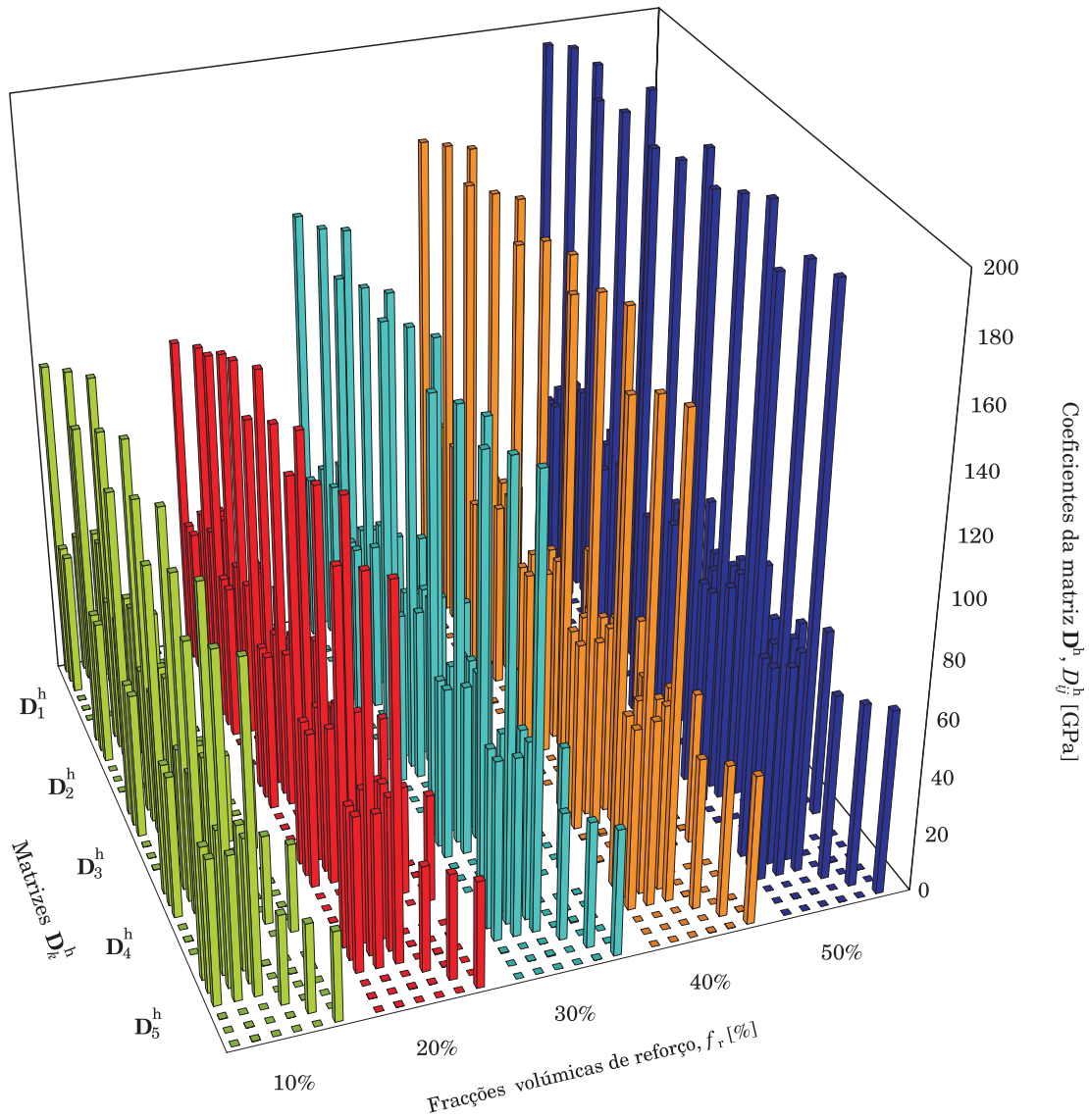


Figura 6.35: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h para células representativas unitárias de AlSiCp com fracções volúmicas de reforço entre 10 e 50%.

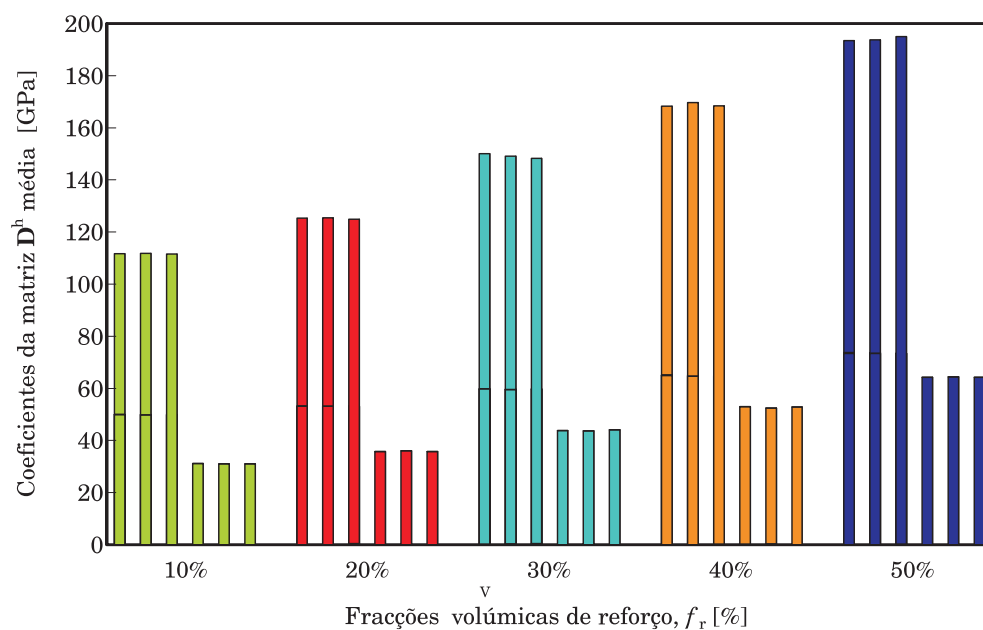


Figura 6.36: Componentes da matriz constitutiva média para cada valor de fracção volúmica.

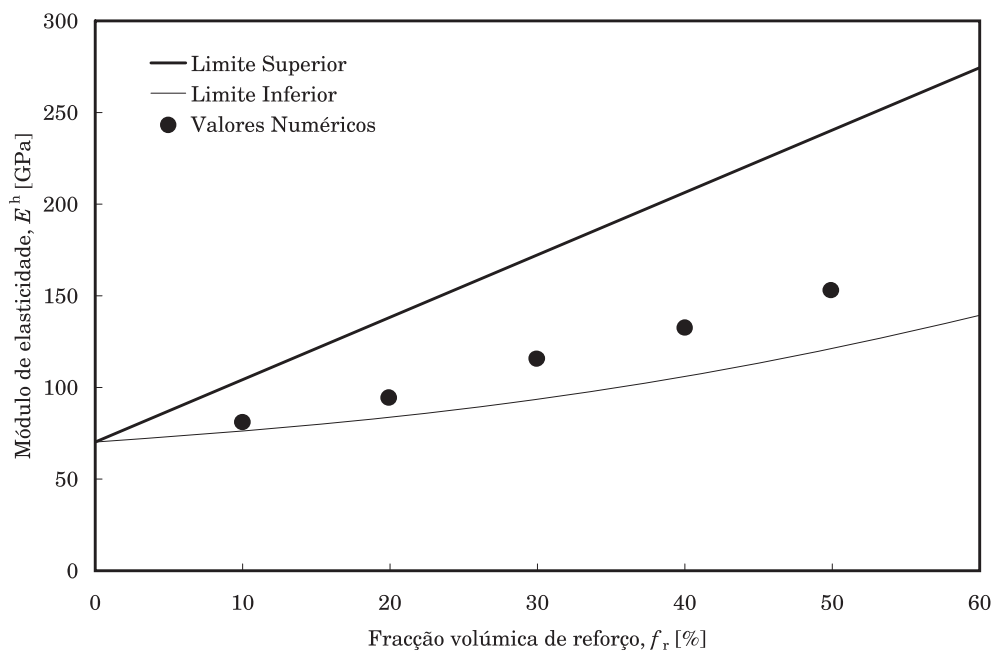


Figura 6.37: Valores das componentes médias de E^h obtidas e curvas-limite superior e inferior definidas pela lei das misturas.

no plano Oyz e submetido a uma tensão de tracção média de 4 GPa na face paralela a Oyz . A malha estruturada da macroescala, representada na figura 6.38, tem 16000 elementos hexaédricos. Para a microescala utiliza-se uma célula representativa unitária com 30% de reforço de partículas esféricas de SiC. A malha não-estruturada é a que se mostra na figura 6.39 e tem 8779 elementos tetraédricos. As propriedades mecânicas da matriz e do reforço são as indicadas na tabela 6.9. Caso se pretendesse realizar a modelação detalhada ao

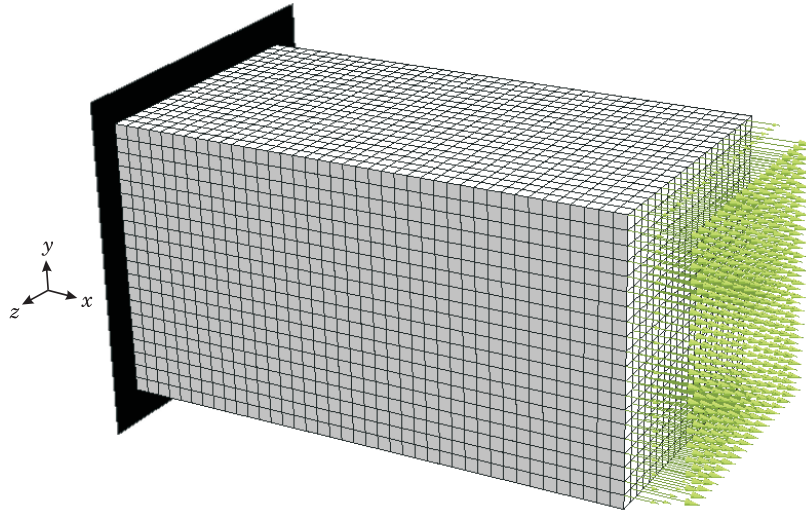


Figura 6.38: Malha de elementos finitos estruturada da macroescala e representação do carregamento imposto.

nível da macroescala, obter-se-ia um problema numérico com o equivalente a 16000 células representativas unitárias³, ou seja, correspondente a cerca de 140×10^6 elementos finitos tetraédricos. Este facto inviabiliza a resolução numérica de tal problema. Uma das soluções possíveis para este problema seria o recurso a computação paralela. Porém, subsistiriam as questões associadas à definição geométrica do modelo. Assim, a solução indicada passa pela utilização das metodologias de homogeneização descritas nos capítulos anteriores.

Na figura 6.40 representam-se os 6 modos próprios χ_{kl} associados aos deslocamentos característicos da CRU. A deformada e os isovalores de deslocamento da macroescala estão representados na figura 6.41. Os deslocamentos longitudinais obtidos na extremidade livre do bloco são indicados na tabela 6.10. Os valores apresentados correspondem às soluções obtidas em simulações numéricas com homogeneização por expansão assintótica e com média volúmica dos materiais constituintes da microescala. Os valores limites resultam do cálculo sem homogeneização, considerando a macroestrutura homogénea com propriedades elásticas correspondentes ao material da matriz e do reforço. Como se pode verificar, as análises numéricas considerando a macroescala constituída unicamente por alumínio e SiC resultaram num deslocamento longitudinal máximo 67% superior e 71% inferior ao resultado homogeneizado, respectivamente. Por sua vez, a diferença entre o valor homogeneizado e o valor obtido recorrendo a médias volúmicas é de 32%.

³Assumindo, como exemplo, uma relação entre escalas ϵ equivalente à relação entre as dimensões dos elementos hexaédricos utilizados e as dimensões globais da macroestrutura.

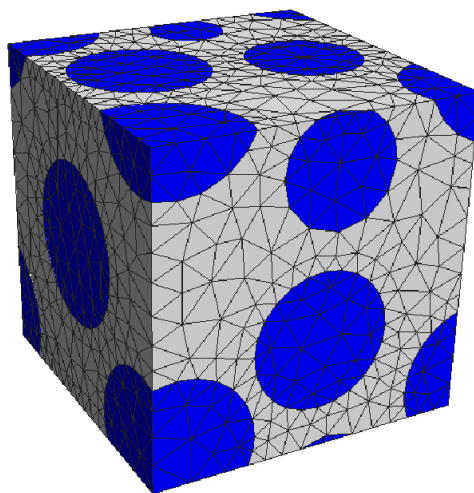


Figura 6.39: Malha de elementos finitos não-estruturada da célula representativa unitária (microescala).

Tabela 6.10: Resultados obtidos para a deformada da macroescala (deslocamentos na direcção Ox).

	Deslocamento [mm]
Matriz (bloco de alumínio)	10,682
HEA	6,3689
Média Volúmica	4,3474
Reforço (bloco de SiC)	1,8238

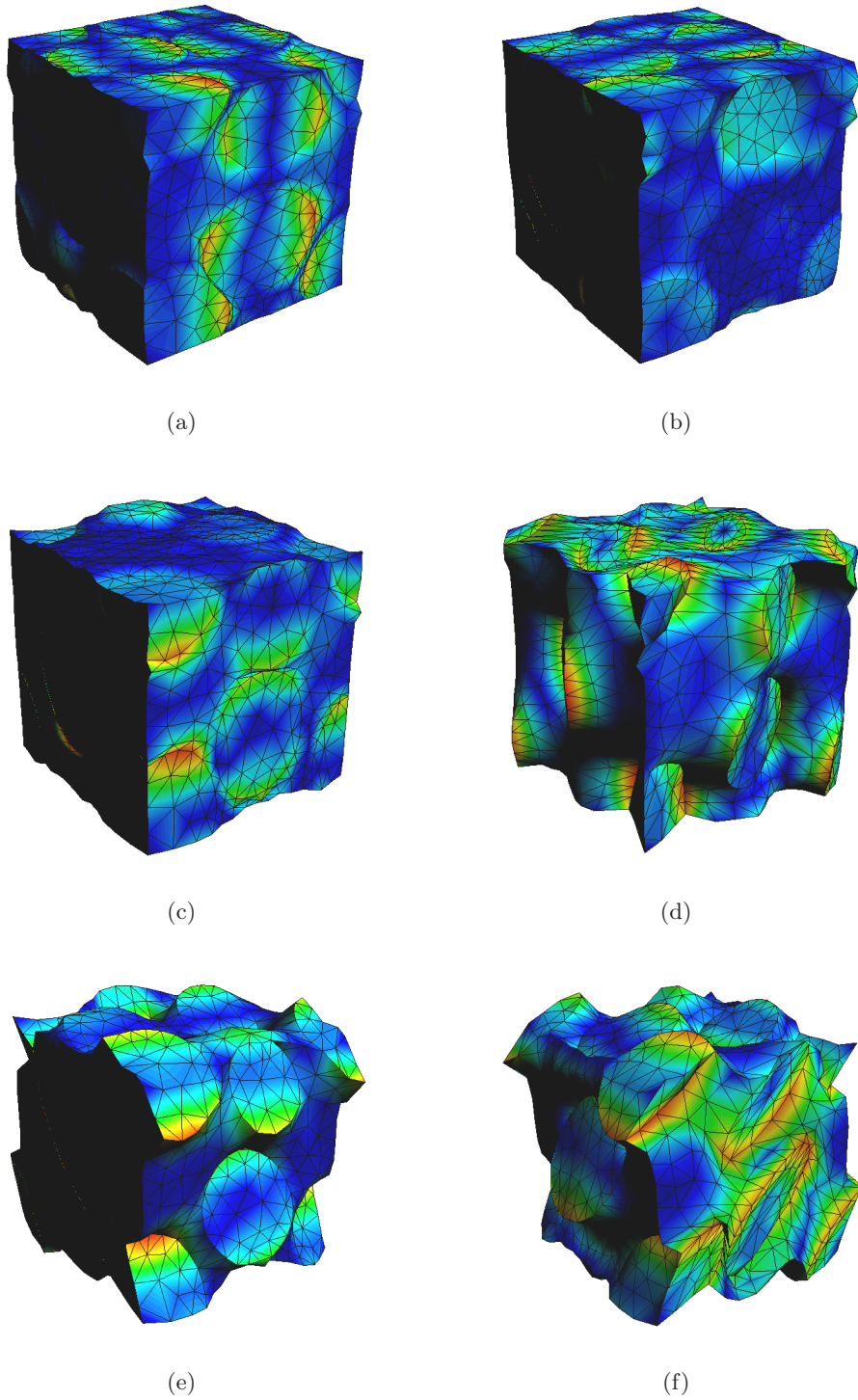


Figura 6.40: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária com 30% de fracção volúmica de reforço. Modos próprios normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} , (c) χ_{33} e de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} , (f) χ_{13} .

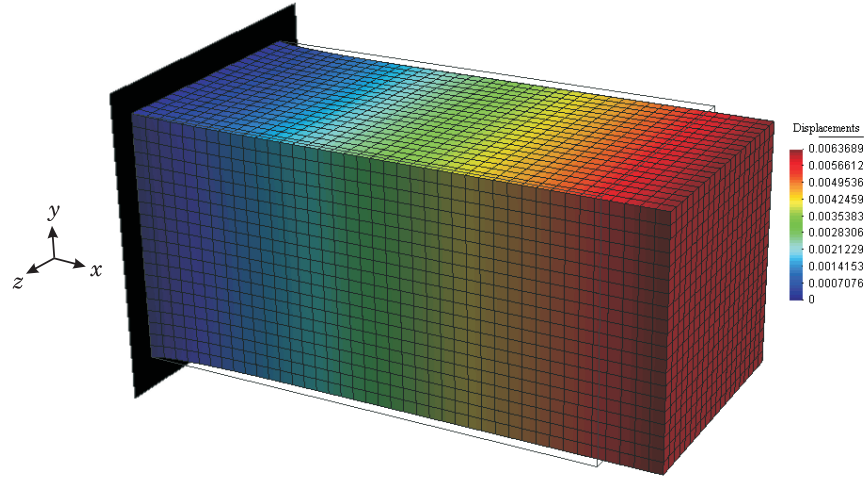


Figura 6.41: Resultados na macroescala. Representação da deformada e dos isovalores de deslocamento segundo a direcção Ox .

Na figura 6.42 mostra-se o resultado do processo de localização (ver Secção 5.2.5). Tal como esperado, o nível de tensão da macroescala corresponde a um valor intermédio aos valores locais, tendo como limites os níveis de tensão na matriz e no reforço na microescala (na célula representativa unitária).

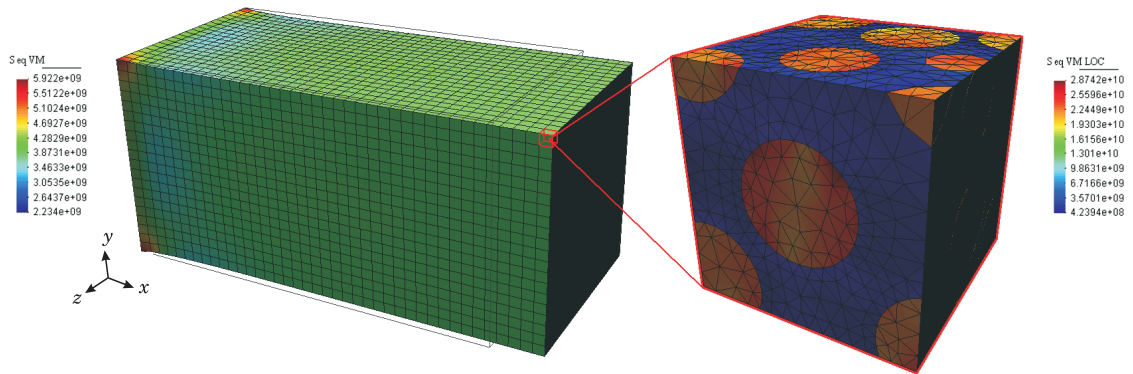


Figura 6.42: Isovalores de tensão equivalente de von Mises [Pa] na microescala, obtidos por localização num ponto de Gauss do elemento macroestrutural realçado.

Face ao exposto, pode concluir-se que a utilização das técnicas de homogeneização por expansão assintótica associadas a malhas de elementos tetraédricos permite contornar os problemas relativos à modelação detalhada do comportamento mecânico macroestrutural.

Capítulo 7

Considerações Finais

7.1 Conclusões

Analisando os resultados apresentados neste trabalho, pode constatar-se que os modelos implementados são, de um modo geral, eficazes. As ferramentas computacionais desenvolvidas demonstraram grande aplicabilidade na análise do comportamento de materiais compósitos de matriz metálica. A introdução do cálculo paralelo revelou-se muito eficiente, podendo, quando associada aos métodos de homogeneização, representar ganhos substanciais em tempo de cálculo na simulação numérica do comportamento mecânico de materiais compósitos. Nos parágrafos seguintes descrevem-se as principais conclusões que se podem retirar deste trabalho.

A verificação do funcionamento do procedimento geral de simulação com o método dos elementos finitos foi feita recorrendo a problemas simples, simulados com elementos finitos hexaédricos e tetraédricos, lineares e quadráticos. Assim, realizaram-se ensaios de tracção, corte e flexão. Associado ao terceiro ensaio, foi feito também um estudo de convergência de malha e analisou-se o funcionamento dos elementos finitos hexaédricos lineares com integração reduzida selectiva. Por fim, num exemplo mais geral de comparação entre elementos finitos, realizou-se um estudo de concentração de tensões. No cômputo geral, nestes ensaios constatou-se que as aproximações obtidas com elementos finitos quadráticos foram globalmente melhores do que as obtidas com elementos lineares. Verificou-se que os tetraedros de 10 nós, em particular, permitem conjugar a elevada qualidade dos resultados com o facto de permitirem a geração automática da malha de elementos finitos. No entanto, em comparação com os elementos lineares, verificou-se uma maior dependência dos elementos quadráticos relativamente ao tipo de problema. Nomeadamente, no ensaio de concentração de tensões, os testes realizados com elementos quadráticos revelaram ligeiras instabilidades nos estudos de convergência, com oscilações da ordem dos 3%, ao passo que os elementos lineares apresentaram uma tendência de convergência mais suave.

Procedeu-se a um conjunto de estudos de desempenho, centrado na utilização método do gradiente conjugado na resolução do sistema de equações lineares, com diferentes preconditionadores. Verificou-se que a utilização de preconditionadores representa ganhos substanciais, especialmente em problemas menos bem-condicionados e em problemas de maiores dimensões. Esta questão é muito importante quando se pretende resolver problemas com condições de fronteira que exijam a utilização de penalidades. De entre os

precondicionadores testados, os melhores resultados foram obtido com a factorização incompleta de Cholesky de nível 0 (IC0). De facto, observou-se uma maior estabilidade do método do gradiente conjugado quando associado ao preconditionador IC0, para além de permitir resolver o sistema com um número inferior de iterações. Apesar de acarretar um procedimento de factorização mais moroso, resulta em ganhos significativos em problemas menos bem-condicionados, assim como em problemas de maiores dimensões. Este preconditionador foi utilizado em testes de desempenho em cálculo paralelo, realizados num *cluster* do tipo Beowulf com 10 processadores. Neste caso, os valores de *speed-up* obtidos apresentaram um comportamento sublinear. Um dos factores que levou a este comportamento foi a influência do tempo de execução em série que, apesar de corresponder sempre a menos de 10% do tempo total de cálculo, tem um peso relativo crescente à medida que o número de processadores vai aumentando. Tal leva a que para a totalidade do cálculo a eficiência decresça com o aumento do número de processadores de forma mais acentuada do que para a resolução do sistema. O valor mínimo de eficiência obtido na fase de resolução do sistema foi de 64%. Verificou-se que a curva de eficiência da fase de resolução do sistema acaba por ser a mais determinante no tempo global de processamento, definindo a forma da curva de eficiência global. Esta apenas é deslocada para valores ligeiramente inferiores devido à parte do processamento realizada em série. Mostrou-se ainda que, embora se verifique um decréscimo progressivo da eficiência paralela do cálculo numérico, a paralelização efectuada reduziu significativamente (aproximadamente 85% para 10 processadores) o tempo total necessário para o cálculo dos problemas analisados.

Com os estudos que conduziram às conclusões anteriores, considerou-se como válida a base de cálculo do programa de elementos finitos desenvolvido ao longo deste trabalho. Assim, procedeu-se à análise dos resultados obtidos recorrendo aos procedimentos associados ao cálculo multiescala. Em particular, em termos de Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA), começou-se por estudar as propriedades elásticas homogeneizadas de associações de materiais em paralelo e em série. Neste contexto, verificou-se que os resultados numéricos de ambos os casos se encontram compreendidos entre os limites das definições analíticas. As diferenças encontradas traduzem o facto da metodologia de HEA contemplar factores microestruturais que traduzem desvios relativamente às associações ideais de materiais. Destacam-se o facto de a HEA contemplar as heterogeneidades geométricas da distribuição dos materiais constituintes e a influência do efeito de Poisson. De seguida, resolveu-se numericamente o problema proposto por Chung *et al.* [Chung 01], onde se analisaram as propriedades mecânicas de uma célula representativa unitária da microestrutura de um compósito de resina epóxida reforçado com fibras de vidro cilíndricas dispostas ortogonalmente. Para além de validar os resultados obtidos com malhas de elementos finitos estruturadas, verificou-se que é possível obter resultados semelhantes com malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos. Constatou-se que a utilização de elementos finitos tetraédricos permite atingir, em termos da norma de \mathbf{D}^h , uma solução equivalente à que se obtém com elementos hexaédricos, com diferenças inferiores a 1%. A HEA com malhas de elementos finitos não-estruturadas requer, no entanto, associações aproximadas de nós para a atribuição de condições de fronteira de periodicidade, processo realizado de forma automática no programa desenvolvido.

Depois de verificar a exequibilidade da homogeneização por expansão assimptótica com malhas de elementos finitos tetraédricos, avançou-se para o estudo das propriedades elásticas de materiais compósitos de partículas de reforço esféricas. A necessidade de efectuar

simulações recorrendo a uma elevada variedade de células representativas unitárias motivou o desenvolvimento de ferramentas específicas. Neste sentido, foi desenvolvido o programa SPHERECELL. Este mostrou ter grande utilidade na obtenção de distribuições de partículas de reforço para a realização de simulações. A geração das geometrias revelou-se eficiente, permitindo controlar alguns dos parâmetros geométricos mais relevantes das células representativas unitárias. Mostrou-se também que as maiores limitações surgem para fracções volúmicas elevadas. De facto, a necessidade de garantir distâncias mínimas entre partículas de reforço dificulta o preenchimento da célula representativa unitária com a fracção volúmica de reforço desejada. Pode também concluir-se que a utilização do modo de geração aleatória se encontra limitado a fracções volúmicas de reforço inferiores a 60%. Assim, geraram-se automaticamente 5 células representativas unitárias para cada fracção volúmica de 10 a 50% reforço. Depois de um estudo de convergência realizado com as malhas de elementos finitos tetraédricos, procedeu-se a uma análise detalhada das matrizes de elasticidade homogeneizadas de cada CRU. Verificou-se que as componentes significativas das matrizes \mathbf{D}^h são as associadas a um comportamento ortotrópico do material. No entanto, embora as matrizes obtidas para as várias células representativas unitárias correspondam a comportamentos ortotrópicos, as suas médias aritméticas apresentam um carácter isotrópico para fracções volúmicas de reforço de 10 e 20% e ortotrópico para fracções volúmicas de reforço iguais ou superiores a 30%. As células representativas unitárias associadas a fracções volúmicas de reforço inferiores apresentam dispersões de partículas de reforço em que existe um maior volume de matriz, sendo a continuidade desta responsável pela maior aproximação a um comportamento isotrópico do material. No caso das células representativas unitárias com fracções volúmicas de reforço superiores, o menor espaço disponível para as esferas se distribuírem induz a formação de agregados, *i.e.* alinhamentos de centros de partículas de reforço que determinam direcções preferenciais de rigidez, e obriga à geração de esferas de diferentes dimensões. Este facto, embora permita elevar a fracção volúmica de reforço, propicia o aumento da interacção entre as partículas e o aparecimento de direcções preferenciais de rigidez. No entanto, um maior número de células representativas unitárias geradas aleatoriamente conduz a resultados que, em média, se aproximam do comportamento isotrópico.

Face ao exposto, em termos gerais, constatou-se que a utilização da técnica de HEA, associada a malhas de elementos finitos tetraédricos, permite contornar os problemas relativos à modelação detalhada do comportamento mecânico macroestrutural de materiais compósitos de matriz metálica reforçados com partículas esféricas.

7.2 Perspectivas de Trabalho Futuro

Pretende-se investir futuramente na melhoria de eficiência e em novas aplicações para o programa 3DFRAN. Assim, destacam-se algumas tarefas futuras. Por um lado, pretende-se implementar outros tipos de elementos finitos. Em particular, utilizar os procedimentos de homogeneização no cálculo de propriedades elásticas de elementos estruturais uni e bidimensionais. Por outro lado, pretende-se desenvolver modos de geração de células representativas unitárias alternativos. Neste sentido, um dos objectivos consiste em controlar a orientação do reforço em CRU de fibras contínuas ou descontínuas, assim como com elipsóides. De elevada utilidade seria validar os estudos efectuados sobre materiais

compósitos com resultados experimentais. Pretende-se ainda implementar outros modelos de comportamento associados à microescala.

Pretende-se também aprofundar o estudo do condicionamento das matrizes de rigidez com *Multi-Freedom Constraints*, tentando quantificar a influência deste tipo de condições de fronteira sobre os valores próprios da matriz de rigidez, o seu número de condição espectral e a taxa de convergência do método do gradiente conjugado. Um objectivo consiste na optimização do cálculo paralelo para cálculo multiescala, conjugado com o cálculo macroestrutural paralelizado. Uma das técnicas previstas consiste na divisão em blocos de cálculo para execução dos 6 sistemas da microescala em simultâneo. Tomando como exemplo um problema resolvido com 6 processadores, cada um dos 6 sistemas da microescala pode ser resolvido de forma independente no respectivo processador. Neste caso, a eficiência resultante deverá ser próxima de 1.

Será ainda interessante desenvolver metodologias de optimização de forma e de topologia com homogeneização. Neste caso, a optimização tanto poderá ser feita ao nível da macroescala, em função da solicitação imposta e das propriedades dos materiais que constituem a microescala, quanto ao nível da própria microescala, onde a distribuição dos materiais constituintes na célula representativa unitária pode ser optimizada para responder à solicitação da macroescala.

Apêndice A

Notação, Nomenclatura e Siglas

A.1 Notações Algébricas

$\mathbf{0}$	–	Tensor nulo
$a, ..., z$	–	Escalares
$A, ..., Z$		
$\alpha, ..., \omega$		
$\mathbf{a}, ..., \mathbf{z}$	–	Vectores e Tensores
$\mathbf{A}, ..., \mathbf{Z}$		
$\alpha, ..., \omega$		
$ \mathbf{A} $	–	Determinante da matriz \mathbf{A}
$\ \mathbf{x}\ _{\mathbf{A}}$	–	Norma- \mathbf{A} do vector \mathbf{x}
\mathbf{A}^{-1}	–	Tensor resultante da inversão de \mathbf{A}
\mathbf{A}^T	–	Tensor resultante da transposição de \mathbf{A}
$\kappa(\mathbf{A})$	–	Número de condição espectral de uma matriz
$\lambda(\mathbf{A})$	–	Valores próprios da matriz \mathbf{A}
$\langle \cdot \rangle_Y$	–	Valor médio em Y

A.2 Subíndices e Superíndices

*	–	Referente a um valor aproximado
c	–	Referente ao material compósito
dev	–	Componente desviadora
dil	–	Componente hidrostática
e	–	Referente a um elemento finito
h	–	Referente a valores homogeneizados
m	–	Referente ao material da matriz
max	–	Valor máximo
min	–	Valor mínimo
p	–	Referente a cálculo paralelo/processadores
r	–	Referente ao material de reforço

s	– Referente a cálculo em série
t	– Referente às condições de fronteira de forças superficiais prescritas
u	– Referente às condições de fronteira de deslocamentos prescritos
v	– Referente a uma quantidade volúmica
w	– Referente a uma quantidade mássica

A.3 Mecânica dos Meios Contínuos

ε	– Tensor das deformações
ν	– Coeficiente de Poisson
ρ	– Massa volúmica
σ	– Tensor das tensões de Cauchy
ψ	– Propriedade genérica
A	– Área
\mathbf{b}	– Vector das forças volúmicas externas
\mathbf{D}	– Matriz de constitutiva ou de elasticidade
E	– Módulo de elasticidade (módulo de Young)
f	– Fração volúmica/mássica de um material
G	– Módulo de elasticidade transversal
L	– Comprimento
$\hat{\mathbf{n}}$	– Versor normal exterior à superfície Γ
\mathbf{S}	– Matriz de flexibilidade de um material elástico
\mathbf{t}	– Vector das forças superficiais externas
\mathbf{u}	– Vector de deslocamentos
V	– Volume
W	– Massa

A.4 Homogeneização

ϵ	– Factor de relação entre as dimensões características dos domínios da micro- e macroescala
Θ	– Campo de deslocamentos característicos de segunda ordem da microescala
χ	– Campo de deslocamentos característicos de primeira ordem da microescala (corrector)
Γ_Y	– Fronteira da célula representativa unitária Y
Ω	– Domínio da macroescala
\mathbf{D}^h	– Matriz de elasticidade homogeneizada
Y	– Domínio da microescala

A.5 Método dos Elementos Finitos

ϵ	–	Factor de ponderação do método $\bar{\mathbf{B}}$ [Nakamura 86]
Γ	–	Superfície de fronteira de um sólido tridimensional genérico
λ	–	Multiplicador de Lagrange
Ω	–	Sólido tridimensional genérico
\mathbf{a}	–	Vector de deslocamentos nodais
\mathbf{B}	–	Matriz das derivadas das funções de forma
$\bar{\mathbf{B}}$	–	Matriz das derivadas das funções de forma para o método $\bar{\mathbf{B}}$
\mathbf{f}	–	Vector de forças nodais
\mathbf{J}	–	Matriz Jacobiana
\mathbf{K}	–	Matriz de Rigidez
\mathcal{L}	–	Polinómio de Lagrange
\mathbf{N}	–	Matriz de funções de forma de um elemento finito
w	–	Peso de integração
w_p	–	Peso de penalidade
\mathbf{x}	–	Vector de coordenadas de um ponto genérico

A.6 Métodos Numéricos

α, β	–	Parâmetros escalares do método do gradiente conjugado
\mathbf{A}	–	Matriz de coeficientes do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{b}	–	Segundo membro do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
e_p	–	Eficiência do cálculo paralelo
\mathbf{F}^D	–	Matriz dos vectores de solicitação do método de homogeneização por expansão assintótica
F_z	–	Força imposta, segundo Oz , na extremidade de uma viga
I	–	Momento de inércia da secção transversal de uma viga
K_{tg}	–	Factor de concentração de tensões
K_m	–	Subespaço de Krylov
N_{D^h}	–	Norma euclidiana da matriz \mathbf{D}^h homogeneizada
n_e	–	Número de elementos
n_p	–	Número de processadores
\mathbf{p}	–	Vector de direcção de busca do método do Gradiente Conjugado
\mathbf{P}	–	Matriz de preconditionamento
\mathbf{r}	–	Vector de resíduos do método do Gradiente Conjugado
S_p	–	<i>Speed-up</i>
t_s	–	Tempo de processamento em série
t_p	–	Tempo de processamento em paralelo
w_z	–	Deslocamento máximo, segundo Oz , na extremidade de uma viga
\mathbf{x}	–	Vector solução do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

A.7 Siglas

CMM	–	Compósito de Matriz Metálica
CRU	–	Célula Representativa Unitária
ECA	–	<i>Embedded Cell Approaches</i>
GC	–	Gradiente Conjugado
HEA	–	Homogeneização por Expansão Assimptótica
HEX8	–	Elemento finito isoparamétrico hexaédrico de 8 nós
IC0	–	Precondicionador de factorização incompleta de Cholesky de nível 0
JAC	–	Precondicionador de Jacobi
LAN	–	<i>Local Area Network</i>
MEF	–	Método dos Elementos Finitos
MFA	–	<i>Mean Field Approaches</i>
MIMD	–	<i>Multiple Instruction streams/Multiple Data streams</i>
MISD	–	<i>Multiple Instruction streams/Single Data stream</i>
MPI	–	<i>Message-Passing Interface</i>
MPICH	–	<i>Message-Passing Interface Chameleon</i>
PC0	–	Algoritmo de resolução do sistema de equações sem preconditionamento
PMA	–	<i>Periodic Microfield Approaches</i>
SIMD	–	<i>Single Instruction stream/Multiple Data streams</i>
SISD	–	<i>Single Instruction stream/Single Data stream</i>
SSOR	–	Precondicionador de sobre-relaxação sucessiva simétrica
TET4	–	Elemento finito isoparamétrico tetraédrico de 4 nós
TET10	–	Elemento finito isoparamétrico tetraédrico de 10 nós
VBM	–	<i>Variational Bounding Methods</i>

Bibliografia

- [Almasi 94] Almasi, G.S., Gottlieb, A.; *Highly Parallel Computing*, 2.^a Ed., The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Redwood City, Califórnia, Estados Unidos da América, 1994.
- [Amdahl 67] Amdahl, G.M.; *Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities*, actas da 1967 AFIPS Spring Joint Computer Conference, AFIPS Press, Reston, Virgínia, Estados Unidos da América, **30**:483–485, 1967.
- [ASM 90] ASM International Handbook Committee; *Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special Purpose Materials*, ASM Handbook, Vol. 2, 10.^a Ed., American Society for Materials, Estados Unidos da América, 1990.
- [Axelsson 96] Axelsson., O.; *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
- [Barret 94] Barrett, R., Berry, M., Chan, T.F., Demmel, J., Donato, J.M., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C., van der Vorst, H.; *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, Filadélfia, Estados Unidos da América, 1994.
- [Bathe 96] Bathe, K.J.; *Finite Element Method Procedures*, Prentice-Hall International, Estados Unidos da América, 1996.
- [Bendsøe 88] Bendsøe, M.P., Kikushi, N.; Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**:197–224, 1988.
- [Bensoussan 78] Bensoussan, A., Lions, J.L., Papanicolaou, G.; *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland, Amesterdão, Países Baixos, 1978.
- [Benzi 02] Benzi, M.; Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey, *Journal of Computational Physics*, **182**:418–477, 2002.
- [Böhm 98] Böhm, H.J.; *A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum Micromechanics*, CDL-FMD-Report, Chrisyian-Doppler-Laboratorium, Institut für Leichtbau und Flugzeugbau, TU Wien, Viena, Áustria, 1998.
- [Böhm 02] Böhm, H.J., Eckschlager, A., Han, W.; Multi-Inclusion Unit Cell Models for Metal Matrix Composites With Randomly Oriented Discontinuous Reinforcements, *Computational Materials Science*, **25**:42–53, 2002.

- [Butler 92] Butler, R., Lusk, E.; *User's Guide to the P4 Parallel Programming System*, Technical Report TM-ANL-92/17, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, 1992.
- [Callister 97] Callister, W.D.; *Materials Science and Engineering: an Introduction*, 4.^a Ed., John Wiley & Sons, 1997.
- [Chung 99a] Chung, P.W., Tamma, K.K.; Woven Fabric Composites — Developments in Engineering Bounds, Homogenization and Applications, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **45**(12):1757–1790, 1999.
- [Chung 99b] Chung, P.W.; *Computational Methods for Multi-Scale/Multi-Physics Problems in Heterogenous/Composite Structures*, Dissertação de Tese de Doutorado, Universidade do Minesota, Minesota, Estados Unidos da América, 1999.
- [Chung 01] Chung, P.W., Tamma, K.K., Namburu, R.R.; Asymptotic Expansion Homogenization for Heterogenous Media: Computational Issues and Applications, *Composites Part A*, **32**:1291–1301, 2001.
- [Cioranescu 99] Cioranescu, D., Donato, P.; *An Introduction to Homogenization*, Oxford Lecture Series in Mathematics and Its Applications **17**, Oxford University Press, Oxford, Reino Unido, 1999.
- [Dal Maso 93] Dal Maso, G.; *An Introduction to Γ -Convergence*, Birkhäuser, Boston, Estados Unidos da América, 1993.
- [Dasgupta 90] Dasgupta, P., Chen, R.C., Menon, S., Pearson, M., Ananthanarayanan, R., Ramachandran, U., Ahamad, M., LeBlanc, R. Jr., Applebe, W., Bernabeu-Auban, J. M., Hutto, P.W., Khalidi, M.Y.A., Wilekloh, C. J.; The Design and Implementation of the Clouds Distributed Operating System, *Computing Systems Journal*, **3**(1):11–46, 1990.
- [Dasgupta 96] Dasgupta, A., Agarwal, R.K., Bhandarkar, S.M.; Three-Dimensional Modelling of Woven-Fabric Composites for Effective Thermo-Mechanical and Thermal Properties, *Composites Science and Technology*, **56**:209–223, 1996.
- [De Giorgi 73] De Giorgi, E., Spagnolo, S.; Sulla Convergenza degli Integrali dell'Energia per Operatori Ellittici del Secondo Ordine, *Bollettino della Unione Matematica Italiana*, **8**:391–411, 1973.
- [Doghri 00] Doghri, I.; *Mechanics of Deformable Solids: Linear, Nonlinear, Analytical and Computational Aspects*, Springer, Berlim, Alemanha, 2000.
- [Dowling 99] Dowling, N.E.; *Mechanical Behaviour of Materials*, 2^a Ed., Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, 1999.
- [Duff 89] Duff, I.S., Erisman, A.M., Reid, J.K.; *Direct Methods for Sparse Matrices*, Oxford University Press, Londres, Reino Unido, 1989.
- [Duncan 90] Duncan, R.; A Survey of Parallel Computer Architectures, *IEEE Computer*, **23**(2):5–16, 1990.

- [Duschlbauer 03] Duschlbauer, D., Pettermann, H.E., Böhm, H.J.; Mori-Tanaka Based Evaluation of Inclusion Stresses in Composites With Nonaligned Reinforcements, *Scripta Materialia*, **48**:223–228, 2003.
- [Eshelby 57] Eshelby J.D.; *The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems*, actas da Royal Society of London Series A241, pp. 376–396, 1957.
- [Farhat 87] Farhat, C., Wilson, E.; A New Finite Element Concurrent Computer Program Architecture, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**:1771–1792, 1987.
- [Felippa 04] Felippa, C.; *Introduction to Finite Element Methods — Material Assembled from Lecture Notes for the Course Introduction to Finite Elements Methods*, Aerospace Engineering Sciences Department of the University of Colorado, Boulder, Estados Unidos da América, 2004.
- [Flynn 66] Flynn, M.J.; *Very High-speed Computing Systems*, actas da IEEE, **54**(12):1901–1909, 1966.
- [Flynn 72] Flynn, M.J.; Some Computer Organizations and Their Effectiveness, *IEEE Transactions on Computers*, **C-21**(9):948–960, 1972.
- [Fonseca 97] Fonseca, J.; *Design of Microstructures of Periodic Composite Materials*, Dissertação de Tese de Doutoramento em Mecânica Aplicada, Universidade de Michigan, Michigan, Estados Unidos da América, 1997.
- [Geist 90] Geist, G.A., Heath, M.T., Peyton, B.W., Worley, P.H.; *A User's Guide to PICL: a Portable Instrumented Communication Library*, Technical Report TM-11616, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, Estados Unidos da América, Outubro 1990.
- [Geist 94] Geist, A., Beguelin, A., Dongarra, J., Jiang, W., Mancheck, R., Sunderam, V.; *PVM: Parallel Virtual Machine — A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*, Scientific and Engineering Series, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1994.
- [Golanski 97] Golanski, D., Terada, K., Kikuchi, N.; Micro and Macro Scale Modelling of Thermal Residual Stresses in Metal Matrix Composite Surface Layers by the Homogenization Method, *Computational Mechanics*, **96**:188–202, 1997.
- [Golub 89] Golub, G.H., O'Leary, D.P.; Some History of the Conjugate Gradient and Lanczos Methods, *SIAM Review*, **31**:50–102, 1989.
- [Gropp 93] Gropp, W.D., Smith, B.; *Chameleon Parallel Programming Tools Users Manual*, Technical Report ANL-93/23, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, Março 1993.
- [Gropp 96] Gropp, W., Lusk, E., Doss, N., Skjellum, A.; A High-Performance, Portable Implementation of the MPI Message Passing Interface Standard, *Parallel Computing*, **22**(6):789–828, 1996.

- [Gropp 01] Gropp, W., Lusk, E.; *Installation and User's Guide for MPICH, a Portable Implementation of MPI*, Technical Report ANL-01/x, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, 2001.
- [Guedes 90] Guedes, J.M., Kikushi, N.; Preprocessing and Postprocessing for Materials Based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **83**(2):143–198, 1990.
- [Hashin 62] Hashin, Z.; The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials, *Journal of Applied Mechanics*, **29**:143–150, 1962.
- [Hashin 63] Hashin, Z., Shtrikman, S.; A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Multiphase Materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**:127–140, 1963.
- [Hashin 64] Hashin, Z., Rosen, B.W.; The elastic Moduli of Fiber Reinforced Materials, *Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME*, **31**:223–232, 1964.
- [Hestenes 52] Hestenes, M.R., Stiefel, E.L.; Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **49**:409–436, 1952.
- [Hill 63] Hill, R.; Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**:357–372, 1963.
- [Hill 65] Hill, R.; A Self Consistent Mechanics of Composite Materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **13**:213–222, 1965.
- [Hollister 91] Hollister, S.J., Fyhrie, D.P., Jepsen, K.J., Goldstein, S.A.; Applications of Homogenization Theory to the Study of Trabecular Bone Mechanics, *Journal of Biomechanics*, **24**(9):825–839, 1991.
- [Hollister 92] Hollister, S.J., Kikushi, N.; A Comparison of Homogenization and Standard Mechanics Analyses for Periodic Porous Composites, *Computational Mechanics*, **10**:73–95, 1992.
- [Irons 80] Irons, B., Ahmad, S.; *Techniques of Finite Elements*, Ellis Horwood Ltd., Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1980.
- [Hughes 87] Hughes, T.J.R.; *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérσία, Estados Unidos da América, 1987.
- [Ibbett 89] Ibbett, R.N., Topham, N.P.; *Architecture of High-Performance Computers*, Vol. II, Macmillan, Londres, Reino Unido, 1989.
- [Karypis 98] Karypis, G., Kumar, V.; *METIS: a Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices, version 4.0*, Technical Report, Universidade de Mineápolis, Mineápolis, Estados Unidos da América, 1998.

- [Kawamoto 93] Kawamoto, T., Kyoya, T.; *Some Applications of Homogenization Method in Rock Mechanics*, actas do Impact of Computational Mechanics on Engineering Problems Seminar, pp. 63–70, 1993.
- [Kim 03] Kim, S.Y., Im, Y.T.; Parallel Processing of 3D Rigid Visco-Plastic Finite Element Analysis Using Domain Decomposition and Modified Block Jacobi Preconditioning Technique, *Journal of Materials Processing Technology*, **134**:254–264, 2003.
- [Lefik 94] Lefik, M., Shreffler, B.A.; 3-D Finite Element Analysis of Composite Beams with Parallel Fibres, Based on Homogenization Theory, *Computational Mechanics*, **14**:2–15, 1994.
- [Lene 92] Lene, F., Paumelle, P.; Micromechanisms of Damage in Woven Composite, *Composite Material Technology*, **45**:97–105, 1992.
- [Martins 99] Martins, E.F.V.; *Multiprocessador de Passagem de Mensagens*, Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia Electrotécnica, Departamento de Electrónica e Comunicações, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 1999.
- [Mathews 94] Mathews, F.L., Rawlings, R.D.; *Composite Materials: Engineering and Science*, 1.^a Ed., Chapman & Hall, 1994.
- [Maxwell 1873] Maxwell, J.C.; *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford, Reino Unido, 1873.
- [Meurant 99] Meurant, G.; Computer Solution of Large Linear Systems; Arnold, D.N., Ciarlet, P.G., Lions, P.L., van der Vorst, H.A. (ed.), *Studies in Mathematics and its Applications*, Vol. 28, North Holland, Elsevier Science B.V., Amesterdão, Países Baixos, 1999.
- [MPIF 94] Message Passing Interface Forum; MPI: A Message-Passing Interface Standard, *The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing*, **8**(3/4):159–416, 1994.
- [Murat 97] Murat, F., Tartar, L.; H-Convergence; Cherkaev, A., Kohn, R. (ed.), *Topics in the Mathematical Modelling of Composite Materials, Series Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications*, Vol. 31, pp. 21–43, Birkhäuser, Boston, Estados Unidos da América, 1997.
- [Nagteegal 74] Nagteegal, J.C., Parks, D.M., Rice, J.R.; On Numerically Accurate Finite Element Solutions in the Fully Plastic Range, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **4**:153–178, 1974.
- [Nakamura 86] Nakamura, T., Shih, C., Freund, L.; Analysis of Dynamically Loaded SE(B) Ductile Fracture Specimen, *Engineering Fracture Mechanics*, **25**:323–339, 1986.
- [Nguetseng 89] Nguetseng, G.; A General Convergence Result for a Functional Related to the Theory of Homogenization, *SIAM Journal of Mathematical Analysis* **20**(3):608–629, 1989.
-

- [Oliveira 04] Oliveira, J.A., Pinho-da-Cruz, J., Andrade-Campos, A., Teixeira-Dias, F.; *On the Modelling of Representative Unit-cell Geometries with GiD*, actas da 2nd Conference on Advances and Applications of GiD, Monografia CIMNE Vol. **88**, pp. 181–184, 2004.
- [Olovsson 06] Olovsson, L., Simonsson, K., Unosson, M.; Shear Locking Reduction in Eight-Noded Tri-Linear Solid Finite Elements, *Computers and Structures*, **84**:476–484, 2006.
- [Oñate 95] Oñate, E.; *Cálculo de Estructuras por el Método de Elementos Finitos — Análisis Estático Lineal*, 2.^a Ed., CIMNE, Barcelona, Espanha, 1995.
- [Ortega 88] Ortega, J.M.; *Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems*, Frontiers of Computer Science, Plenum Publishing Co., Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1988.
- [Pilkey 97] Pilkey, W.D.; *Peterson's Stress Concentration Factors*, 2.^a Ed., John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1997.
- [Pinho-da-Cruz 03] Pinho-da-Cruz, J., Ferreira, J., Costa, J., Borrego, L.; Fatigue Analysis of Thin AlMgSi Welded Joints Under Constant and Variable Amplitude Block Loadings, *Thin-Walled Structures*, **41**:349–402, 2003.
- [Pinho-da-Cruz 05] Pinho-da-Cruz, J., Oliveira, J., Andrade-Campos, A., Teixeira-Dias, F.; *Cálculo Estrutural Elástico de Materiais Compósitos de AlSiC_p Recorrendo a Técnicas de Paralelização e Homogeneização Assintótica*, actas do Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2005, Granada, Espanha, 2005.
- [Poisson 1824] Poisson, S.D.; *Second Mémoire sur la Théorie du Magnétisme*, Académie Royale des Sciences de l'Institut de France, **5**:488–533, 1824.
- [Rayleigh 1892] Rayleigh, J.W.; On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium, *Philosophical Magazine*, **34**:481–502, 1892.
- [Reid 71] Reid, J.; *On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations*, actas da Oxford Conference of the Institute of Mathematics and Its Applications: Large Sparse Sets of Linear Equations, pp. 231–254, Academic Press, Londres, Reino Unido, 1971.
- [Rizzo 91] Rizzo, A.R.; Estimating Errors in FE Analyses, *Mechanical Engineering*, pp. 61–63, 1991.
- [Saad 03] Saad, Y.; *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2.^a Ed., SIAM, Filadélfia, Estados Unidos da América, 2003.
- [Saint-Georges 96] Saint-Georges, P., Warzee, G., Beauwens, R., Notay, Y.; High-Performance PCG Solvers for FEM Structural Analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**:1313–1340, 1996.
-

- [Sanchez-Hubert 92] Sanchez-Hubert, J., Sanchez-Palencia, E.; *Introduction aux Méthodes Asymptotiques et à L'Homogénéisation — Application à la Mécanique des Milieux Continus*, Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise, Masson, Paris, França, 1992.
 - [Sanchez-Palencia 70] Sanchez-Palencia, E.; Solutions Périodiques par Rapport aux Variables d'Espace et Applications, *Compte-rendus de l'Académie des Sciences, série A-B*, **271**:A1129–A1132, 1970.
 - [Sanchez-Palencia 80] Sanchez-Palencia, E.; *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Lectures Notes in Physics **127**, Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, 1980.
 - [Segurado 02] Segurado, J., Llorca, J.; A Numerical Approximation to the Elastic Properties of Sphere-Reinforced Composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **50**:2107–2121, 2002.
 - [Shkoller 95] Shkoller, S., Hegemier, G.; Homogenization of Plane Weave Composites Using Two-Scale Convergence, *International Journal of Solids and Structures*, **32**(6/7):783–794, 1995.
 - [Silva 99] Silva, V.D.; *Mecânica e Resistência dos Materiais*, 2.^a Ed., ZUARI, Coimbra, Portugal, 1999.
 - [Skillicorn 88] Skillicorn, D.B., A Taxonomy For Computer Architectures, *IEEE Computer*, **21**(11):46–57, 1988.
 - [Smith 82] Smith, L.M., Griffiths, D.V.; *Programming the Finite Element Method*, 2.^a Ed., John Wiley & Sons, Chichester, Reino Unido, 1982.
 - [Smith 96] Smith, B.F., Bjørstad, P.E., Gropp, W.D.; *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
 - [Smith 98] Smith, W. F.; *Princípios de Ciência e Engenharia dos Materiais*, 3.^a Ed., McGraw-Hill, Lisboa, Portugal, 1998.
 - [Song 06] Song, Y.S., Youn, J. R.; Modeling of Effective Elastic Properties for Polymer Based Carbon Nanotube Composites, *Polymer*, **47**:1741–1748, 2006.
 - [Sonzogni 02] Sonzogni, V.E., Yommi, A.M., Nigro, N.M., Storti, M.A.; A Parallel Finite Element Program on a Beowulf Cluster, *Advances in Engineering Software*, **33**:427–443, 2002.
 - [Spagnolo 68] Spagnolo, S.; Sulla Convergenza di Soluzioni di Equazioni Paraboliche ed Ellittiche, *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa*, **22**:571–597, 1968.
 - [Stathis 04] Stathis, P.T.; *Sparse Matrix Vector Processing Formats*, Tese de Doutorado em Engenharia de Computadores, Universidade de Delft, Delft, Países Baixos, 2004.
-

- [Sterling 99] Sterling, T.L., Salmon, J., Becker, D.J., Savarese, D.F.; *How to Build a Beowulf: a Guide to the Implementation and Application of PC Clusters*, MA: MIT Press, Cambridge, Reino Unido, 1999.
- [Stone 93] Stone, H.S.; *High-Performance Computer Architecture*, 3.^a Ed., Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachussets, Estados Unidos da América, 1993.
- [Sunderam 90] Sunderam, V.S.; PVM: A Framework for Parallel Distributed Computing, *Concurrency: Practice and Experience*, **2**(4):315–339, 1990.
- [Tartar 78] Tartar, L.; Quelques Remarques sur l’Homogénéisation, Functional Analysis and Numerical Analysis, actas do *Japan-France Seminar 1976*, Japan Society for the Promotion of Science, pp. 469–482, 1978.
- [Teixeira-Dias 04] Teixeira-Dias, F., Andrade-Campos, A., Pinho-da-Cruz, J., Oliveira, J.A.; High Volume Fraction AlSiCp Composites — A Numerical Study on the Thermal Expansion Coefficient, actas da *7th International Conference on Computational Structures Technology*, Lisboa, Portugal, Setembro 2004.
- [Terada 96] Terada, K.; *Global-Local Modeling for Composites by the Homogenization Method*, Dissertação de tese de Doutoramento, Universidade de Michigan, Michigan, Estados Unidos da América, 1996.
- [Timoshenko 70] Timoshenko, S.P., Goodier, J.N.; *Theory of Elasticity*, 3.^a Ed., McGraw-Hill, 1970.
- [Torquato 91] Torquato, S.; Random Heterogeneous Media: Microstructure and Improved Bounds on Effective Properties, *Applied Mechanics Reviews*, **44**:37–76, 1991.
- [Torquato 98a] Torquato, S.; Effective Stiffness Tensor of Composite Media — I. Exact Series Expansions, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**(9):1421–1448, 1998.
- [Torquato 98b] Torquato, S.; Effective Stiffness Tensor of Composite Media — II. Applications to Isotropic Dispersions, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **46**(8):1411–1440, 1998.
- [van der Vorst 03] van der Vorst, H.A.; *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Vol. 13, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2003.
- [Whitcomb 91] Whitcomb, J.D.; Three Dimensional Stress Analysis of Plain Weave Composites; O’Brien, T.K. (ed.), *Composite Materials: Fatigue and Fracture*, Vol. 3, ASTM STP 1110, pp. 417–438, Estados Unidos da América, 1991.
- [Zienkiewicz 89] Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L.; *The Finite Element Method*, Vol. I, 4.^a Ed., McGraw-Hill, Londres, Reino Unido, 1989.

